

INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

ESTUDO NUMÉRICO DA EQUAÇÃO DE
KARDAR, PARISI E ZHANG

Vladimir Gonçalves Miranda

vladimir@if.uff.br

Orientador: Fábio David Alves Aarão Reis

reis@if.uff.br

Niterói, 4 de Março de 2009

ESTUDO NUMÉRICO DA EQUAÇÃO DE KARDAR, PARISI E ZHANG

Dissertação apresentada ao Departamento de Física da UFF como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Março de 2009

À memória de meu tio Paulo Cesar Moutinho Gonçalves.

Agradecimentos

Nelson Cavaquinho e Guilherme de Britto no seu belo samba “Quando eu me chamar saudade“, dizem: ”...Se alguém quiser fazer por mim/ que faça agora/ me dêem as flores em vida/ um sorriso/ a mão amiga/ para aliviar meus ais/ Depois que eu me chamar saudade/ não preciso de vaidades/ quero preces e nada mais...”

Aproveito então esta oportunidade para agradecer aos que me estenderam “a mão amiga” e “entregar-lhes as flores“ merecidas.

Em primeiro lugar, agradeço a minha mãe, Vanda, por todo carinho, dedicação e apoio dado para que eu pudesse chegar até aqui.

À minha namorada, Maria Eugenia. A meus amigos Orahcio Felício de Sousa e Tiago José de Oliveira. Ao primeiro pelas incansáveis discussões e dicas de ”como usar um computador“. E ao segundo, pelas preciosas discussões que ajudaram a melhorar o presente trabalho.

Ao Fábio pela orientação e paciência desde os tempos de iniciação científica.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Por fim, porém não menos importante, aos demais amigos, professores e funcionários que contribuíram para tornar esta caminhada menos árdua.

Resumo

Integramos numericamente a equação de Kardar, Parisi e Zhang (KPZ) em uma e duas dimensões, discretizando-a usando o método de diferenças finitas usual, e substituindo o termo não-linear da equação $|\nabla h|^2$ por uma função exponencialmente decrescente desta quantidade.

No estudo em uma dimensão, mostramos que a discretização por nós adotada é capaz de resolver os dois principais problemas encontrados com a discretização usual: instabilidade numérica e inconsistência entre os parâmetros da versão discretizada e da contínua. Nesse ponto, nosso estudo é um avanço em relação a maioria dos trabalhos anteriores com a equação KPZ, que sempre tratavam destes problemas em separado.

Em duas dimensões, avaliamos e confirmamos a universalidade das distribuições de alturas e de rugosidades na classe KPZ através da variação sistemática dos parâmetros da equação. Obtivemos estimativas para a curtose e o coeficiente de assimetria das distribuições de alturas e de rugosidades, no estado estacionário. Também obtivemos estimativas dos expoentes de rugosidade. Observamos que as distribuições de rugosidade mostram correções de escala muito fracas e verificamos o decaimento do tipo exponencial estendido das caudas de tais distribuições. Nossos resultados confirmam estimativas previamente obtidas por simulações computacionais de modelos discretos, mostrando sua confiabilidade como membros da classe KPZ.

Abstract

We integrate numerically the Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) equation in one and two dimensions using the usual finite differences scheme and the replacement of $|\nabla h|^2$ by exponentially decreasing functions of that quantity.

In one dimension the study showed that the discretization scheme adopted by us was able to solve the two major problems found with the usual discretization: numerical instabilities and inconsistency between the parameters of the discretized and the continuum version. Our study advances over previous works on the KPZ equation, which usually treated those problems apart.

In two dimensions, we evaluated and confirmed the universality of steady state height and roughness distributions in KPZ class by a systematic variation of the equation's parameters. Estimates of kurtosis and skewness of steady state height and roughness distributions were provided. We also obtained roughness exponents estimates. We observed the weak scaling corrections behavior of steady state roughness distributions and verified the evidence of stretched exponential tails of such distributions. Our results confirm previous estimates from lattice models, showing their reliability as representatives of the KPZ class.

Sumário

1	Introdução	11
2	Equações contínuas de crescimento	15
2.1	Apresentação	16
2.2	Conceitos e grandezas de interesse	17
2.2.1	Conceitos de escala	19
2.3	Princípios de simetria	21
2.3.1	Teoria linear: a equação de Edwards-Wilkinson (EW)	23
2.4	A equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ)	25
2.5	Modelos discretos	30
3	Integração numérica da equação KPZ.	33
3.1	Método de diferenças finitas.	34
3.1.1	A escolha dos incrementos espacial e temporal.	36
3.2	Anomalias com as integrações numéricas da equação.	37
3.2.1	Instabilidades.	37
3.2.2	Inconsistência entre os parâmetros da equação discreta e contínua.	44

<i>SUMÁRIO</i>	6
3.3 Discretizações aperfeiçoadas da equação KPZ	48
4 Estudo numérico da equação KPZ	51
4.1 Motivação	52
4.2 Discretização da equação	53
4.3 Estudo numérico em 1 dimensão	56
4.4 Estudo numérico em 2 dimensões	59
4.4.1 Conjuntos utilizados	59
4.4.2 Expoentes de rugosidade	60
4.4.3 Universalidade das distribuições de alturas	63
4.5 Universalidade das distribuições de rugosidade ao quadrado . .	67
4.5.1 Distribuição com cauda do tipo exponencial alongada .	72
5 Conclusão	76

Lista de Figuras

2.1	Dependência do tempo de saturação com o tamanho do depósito. As curvas de baixo para cima correspondem aos tamanhos $L = 8, 16, 32$ e 64 , respectivamente. Os dados são proveni- entes da resolução numérica da equação KPZ em $d = 2$	20
2.2	Ilustração do processo de crescimento para o modelo DB.	31
2.3	Ilustração do processo de crescimento para o modelo RSOS. Note que a adição das partículas B e C à superfície é rejeitada, pois isto violaria as regras de crescimento do modelo.	32
3.1	Perfis de uma interface em $d=1$ obtidas a partir da integração numérica da equação KPZ, usando a equação 3.9, nos instantes (a) $t = 55.5$ e (b) $t = 55.8$. Note a diferença na escala vertical em (a) e (b) devido ao rápido crescimento de uma instabilidade em $x \approx 120$	38
3.2	Probabilidade de uma instabilidade ocorrer até o tempo t , in- duzida por um pico de altura h_0 para a equação KPZ discreta em 1 dimensão, como função do tempo. Os valores de h_0 tes- tados foram iguais a 24, 25 e 26. Extraído de [18].	40

3.3	Dependência de h_c com λ , para a equação LD discretizada em 1 e 2 dimensões, e para a equação KPZ discretizada em 1 dimensão. Extraído de [18].	41
3.4	Tempo médio até o aparecimento de uma instabilidade τ_{ins} como função de λ , para a versão discreta da equação KPZ em 1D. Extraído de [18].	43
3.5	Largura da interface W contra o tamanho do depósito L , para $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_0 = 3$. Extraído de [16]. (Note que os autores denotaram a rugosidade no estado estacionário por W ao passo que nós usamos w_{sat}	45
3.6	Função de correlação para os casos $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_0 = 3$. Extraído de [16].	46
4.1	Amplitude da rugosidade ao quadrado como função do inverso do tamanho dos depósitos obtida através da integração da equação KPZ em $d = 1$ usando as equações (3.9) (\circ) e a equação (3.9) com a função de correção $f(\nabla h ^2)$ substituindo $ \nabla h ^2$ (\square), utilizando $c = 1.0$	58
4.2	Expoentes efetivos α versus o inverso do tamanho da rede para interfaces KPZ em $d = 2$. Os símbolos correspondem aos conjuntos A (\diamond), B (\square), C (\circ) e D (+). Para $L \leq 64$ as barras de erro são menores que o tamanho dos símbolos. Para $L = 128$ a incerteza em $\alpha(L)$ é cerca de 0.01.	62

- 4.3 (a) Coeficiente de assimetria e (b) curtose das distribuições de alturas de interfaces KPZ em $d = 2$ versus inverso do tamanho da rede. Cada símbolo corresponde ao mesmo conjunto da figura 4.2. 64
- 4.4 Mesmo que a figura 4.3, mas agora incluindo as barras de erro. 65
- 4.5 Distribuições de rugosidade escaladas pela relação (4.12) para interfaces KPZ em $d = 2$ para os conjuntos A, B, C e D. Os símbolos são os mesmos que na figura 4.2. 69
- 4.6 Distribuições de rugosidade escaladas pela relação (4.12) para interfaces KPZ em $d = 2$ para os conjuntos C e D ($L = 128$), e para o modelo RSOS ($L = 256$). A curva cheia corresponde ao modelo RSOS, e os demais símbolos são os mesmos da figura 4.2. 70
- 4.7 Distribuições de rugosidade escaladas pela relação (4.12) para interfaces KPZ em $d = 2$ para o conjunto B para os tamanhos de rede $L = 8(\square)$, $16(\times)$, $32(\diamond)$, $64(\circ)$ e $128(-)$ 72
- 4.8 Exponentes efetivos $\gamma(x)$ vs $1/x^2$ das distribuições de rugosidade para interfaces KPZ em $d = 2$. Aqui usamos $\Delta = 4$ e o tamanho da rede é $L = 64$. Os símbolos são os mesmos da figura 4.2. 74
- 4.9 Mesmas grandezas da figura 4.8, para o tamanho de rede $L = 128$ 74
- 4.10 Mesmas grandezas da figura 4.8, para $\Delta = 1$, e usando os conjuntos A, B e D. 75

Lista de Tabelas

4.1	Parâmetros não-lineares usados na integração da equação KPZ em $d = 2$, e as correspondentes constantes para controle das instabilidades. Em todos os casos, $\nu = 0.5$ e $D = 0.005$	60
4.2	Coefficiente de assimetria e curtose da distribuição de rugosidade dos conjuntos A, B, C e D, para $L = 128$	71

Capítulo 1

Introdução

Interfaces têm um papel importante no entendimento de uma grande quantidade de processos físicos, químicos e biológicos. Além de ter grande importância prática como, por exemplo, na qualidade de um cristal em crescimento que é determinada pela evolução de sua superfície. O interesse no estudo de interfaces também se dá pelo fato de existirem muitos problemas associados à formação de padrões em clusters e frentes de solidificação.

O fenômeno de enrugamento cinético é encontrado sempre que uma interface é colocada em movimento na presença de flutuações, sejam elas de origem térmica, cinética ou de outra natureza. A característica quantitativa mais simples de uma interface é a sua *rugosidade*, que é dada pelo desvio padrão em torno da altura média da interface. A primeira investigação teórica de rugosidade de uma superfície em processos de crescimento foi dada pelo modelo de Eden [8], originalmente proposto para descrever o formato de colônias celulares, e com o modelo de deposição balística (DB) [7]. Grande avanço no entendimento de aspectos universais destes processos foi alcançado com

o trabalho de Kardar, Parisi e Zhang, com a criação da chamada equação KPZ [6], que é a equação não-linear mais simples possível, derivada a partir das idéias de universalidade, capaz de descrever a dinâmica de crescimento aplicável a modelos como o de Eden e o DB. Diversas aplicações da equação KPZ podem ser encontradas nas Refs. [1, 9]. Essas aplicações e o interesse intrínseco na equação como um modelo da mecânica estatística fora do equilíbrio motivou intenso estudo teórico acerca das propriedades da equação e das propriedades de modelos de rede na classe KPZ, isto é, modelos que obedecem à equação KPZ no limite contínuo (tempos longos, e tamanhos de redes grandes).

Muitas propriedades de sistemas KPZ em $d = 1$ são conhecidas porque a distribuição de alturas no estado estacionário (estado onde a rugosidade do sistema deixa de crescer e passa a flutuar em torno de um valor constante), para condições de contorno periódicas é a mesma que a da equação de Edwards e Wilkinson (EW), que é uma equação linear, equivalente ao caso particular da equação KPZ sem o termo não-linear. Este resultado e a chamada propriedade de invariância galileana são os responsáveis por possibilitar que o valor exato dos expoentes de escala da rugosidade média da interface nesta dimensão sejam obtidos. No próximo capítulo, mostraremos os principais resultados obtidos para a equação KPZ em $d = 1$, e apresentaremos as principais grandezas e conceitos de interesse da Física de superfícies do ponto de vista da mecânica estatística. Uma forma de derivar equações contínuas de crescimento será discutida e aplicada para derivar a equação EW. No fim do capítulo falaremos um pouco dos modelos discretos.

Por outro lado, um número pequeno de resultados exatos são conhecidos

no caso de maior importância prática para sistemas reais, que é $d = 2$. Estimativas dos expoentes em $d \geq 2$ foram obtidas por alguns métodos analíticos como em [38], mas suas previsões estão em desacordo com resultados numéricos mais precisos [33, 34]. Distribuições de alturas e de rugosidades da interface também foram calculadas numericamente [33, 34, 42, 43] porque estas quantidades são úteis para comparação com dados provenientes de sistemas reais e ainda podem ser usadas para testar resultados analíticos. Porém, os dados numéricos obtidos com precisão provém de apenas dois ou três modelos discretos.

É desejável que a universalidade das quantidades mencionadas acima seja observada diretamente a partir da equação KPZ. A integração da equação KPZ não é um assunto novo, já tendo sido realizada por diversos autores [17, 23, 24, 35, 37]. Mas em geral estes trabalhos estavam focados no cálculo de expoentes de escala. Mais recentemente, as distribuições de alturas e rugosidades vem sendo propostas para caracterizar classes de universalidade em processos de crescimento, no entanto, estas grandezas nunca foram calculadas diretamente a partir da equação KPZ.

O objetivo desta dissertação é preencher esta lacuna analisando resultados numéricos das distribuições de alturas e rugosidades, no estado estacionário, a partir da integração da equação KPZ utilizando diversos conjuntos de parâmetros da equação. Além disso, avaliaremos os principais problemas até o momento encontrados com as integrações numéricas da equação KPZ.

No capítulo 3, apresentaremos o principal método utilizado para discretizar a equação KPZ e os principais problemas inerentes a ele. Algumas discretizações aperfeiçoadas desenvolvidas para resolver estes problemas serão

discutidas. Em seguida, no capítulo 4 mostramos nosso estudo numérico da equação KPZ em $d = 1$ e $d = 2$. Mostraremos que a discretização por nós adotada resolve os principais problemas levantados até o momento com outras versões discretas da equação KPZ. Em $d = 2$, a universalidade das distribuições de alturas e de rugosidades será confirmada, e ainda mostraremos nossas estimativas para os expoentes de rugosidade da equação KPZ.

Encerramos nossas discussões no capítulo 5 onde nossas conclusões, considerações finais, e implicações deste trabalho para outras questões em aberto acerca da equação KPZ são levantadas.

Capítulo 2

Equações contínuas de crescimento

Neste capítulo introduzimos a equação KPZ, que é o principal objetivo de nosso estudo. Iniciamos o capítulo apresentando a motivação para o uso de equações diferenciais estocásticas no estudo do crescimento de superfícies ou interfaces. Depois definimos algumas grandezas de interesse na Física de superfícies e discutimos alguns conceitos de escala. Um procedimento utilizado na construção de equações contínuas de crescimento é apresentado e a partir daí ilustramos o uso deste procedimento desenvolvendo a equação EW diretamente através de “princípios de simetria”. Em seguida a equação KPZ e suas principais características são analisadas. Por fim modelos discretos na chamada *classe KPZ* são comentados brevemente.

2.1 Apresentação

O processo de crescimento de uma superfície é altamente aleatório, por exemplo, num caso de grande importância tecnológica que é a construção de “filmes finos“, átomos que são depositados sobre um substrato muito limpo para formar a superfície podem se agregar à outros já presentes no sistema formando ligações, se difundir através da superfície ou até mesmo evaporarem da mesma.

Um modelo matemático que se preste a explicar o fenômeno de formação de uma superfície, para ter sucesso, necessita incorporar os “efeitos estocásticos” que se apresentam. Uma das ferramentas usadas com este fim são as *equações diferenciais estocásticas*. Neste tipo de abordagem, é preciso que tenhamos uma função contínua $h(\vec{x}, t)$ que descreva a altura da superfície na posição \vec{x} num dado instante t . Como, em geral, a superfície formada por um processo de crescimento não é analítica quando observada no nível atômico, pois nessa escala ela não é diferenciável já que consiste de saltos discretos, para obtenção de uma descrição contínua toma-se o limite em que apenas flutuações da altura da interface maiores que o espaçamento da rede cristalina são consideradas (o termo “coarse-grain“ costuma ser atribuído a este procedimento). Isto quer dizer que na escala de comprimento das equações contínuas a abordagem da dinâmica de crescimento é ”mesoscópica“.

De uma maneira geral, uma equação estocástica de crescimento é da forma [1]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = G(h, \vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.1)$$

onde na expressão 2.1, G é uma função que depende da altura h , da posição \vec{x} e do tempo t , e $\eta(\vec{x}, t)$ é um ruído que incorpora a natureza aleatória do processo. A determinação da forma de G ou do ruído η depende do fenômeno específico que se esteja estudando. Adiante, apresentamos uma metodologia bastante geral para a determinação da forma de G . Antes, porém, introduzimos os principais conceitos e grandezas de interesse no estudo da física de superfícies.

2.2 Conceitos e grandezas de interesse

Formalizaremos alguns conceitos que serão usados com frequência no texto. Embora as definições que daremos aqui sejam válidas apenas para modelos em rede (a serem definidos no final do capítulo), e estejamos falando de equações contínuas, esta é a forma mais simples de definir as grandezas de maior interesse em nosso estudo, além de ser a linha usual de apresentação dessas quantidades [1].

Substrato: Local onde as partículas são depositadas. Os substratos que iremos considerar são dados de um modo geral por hipercubos de aresta L . E cada posição do substrato é caracterizada pelo vetor de coordenadas \vec{x}

Fisicamente, o substrato pode ser por exemplo, uma superfície de silício.

Tamanho do substrato: Para um substrato d -dimensional o seu tamanho (número de sítios) é dado por L^d , onde d é a dimensão do hipercubo.

Superfície (ou interface): É o conjunto de partículas com maior altura em cada posição \vec{x} do substrato, num dado instante t .

Denotando por $h(\vec{x}, t)$ a altura da superfície na posição \vec{x} no instante t ,

as principais grandezas de interesse nesta área são:

Altura média: $\bar{h} \equiv \frac{1}{L^d} \sum_{\vec{x}} h(\vec{x}, t)$

Rugosidade ou largura da interface: $w \equiv \left\langle \sqrt{(\bar{h}^2 - \bar{h}^2)} \right\rangle$,

onde o símbolo $\langle . \rangle$ denota média sobre diferentes realizações. A rugosidade nada mais é que uma medida da flutuação das alturas em torno da altura média da superfície.

Rugosidade ao quadrado: $w_2 \equiv \left\langle (\bar{h}^2 - \bar{h}^2) \right\rangle$,

Para a rugosidade e a rugosidade ao quadrado no estado estacionário (que discutiremos a seguir) usaremos a notação $\langle w_{sat} \rangle$ e $\langle w_{2sat} \rangle$, respectivamente, para denotar que estas grandezas estão sendo calculadas quando o sistema já atingiu o seu estado estacionário.

Outras grandezas de interesse são os momentos centrais da distribuição de alturas, dados por:

Momento central de ordem n: $w_n \equiv \left\langle \frac{1}{L^d} \sum ((h(\vec{x}, t) - \bar{h})^n) \right\rangle$

No caso contínuo, as grandezas definidas acima são facilmente obtidas substituindo-se as somas por integrais ao longo da interface.

Para uma superfície ser completamente caracterizada, do ponto de vista da mecânica estatística, é preciso conhecer todos os seus momentos, ou o que é equivalente, conhecer a distribuição de probabilidades das alturas. Dificilmente é possível o conhecimento de todos os momentos ou da função de distribuição. Em trabalhos numéricos costuma-se usar razões adimensionais entre momentos [2, 3] para caracterizar a distribuição de alturas. As razões mais importantes são conhecidas como *coeficiente de assimetria* (skewness, em inglês) e *curtose* e são definidas, respectivamente por:

$$S \equiv \frac{w_3}{w_2^{3/2}}, \quad (2.2)$$

$$Q \equiv \frac{w_4}{w_2^2} - 3, \quad (2.3)$$

O coeficiente de assimetria, como o próprio nome sugere, mede o quanto a forma da curva da função densidade de probabilidade é assimétrica em relação à média. Já a curtose avalia o “achatamento” da curva de densidade de probabilidade em relação a uma gaussiana, ou seja, avalia o peso das caudas da distribuição.

2.2.1 Conceitos de escala

Para monitorar o processo de enrugamento quantitativamente mede-se a rugosidade em função do tempo acompanhando a sua evolução em um gráfico como na figura 2.1. Tipicamente observa-se duas regiões bem distintas, separadas por um tempo de cruzamento τ . Antes de τ a rugosidade cresce com uma potência do tempo como

$$w \sim t^\beta. \quad (2.4)$$

Esta região é conhecida como região de crescimento, e β é denominado expoente de crescimento, caracterizando a dinâmica dependente do tempo. Após τ o sistema “satura” e a rugosidade passa a flutuar em torno de um valor constante w_{sat} . Este regime é conhecido como estado estacionário. O valor de w_{sat} aumenta com o tamanho do sistema, seguindo também uma lei de

potência:

$$w_{sat} \sim L^\alpha, \quad (2.5)$$

onde α é chamado de expoente de rugosidade.

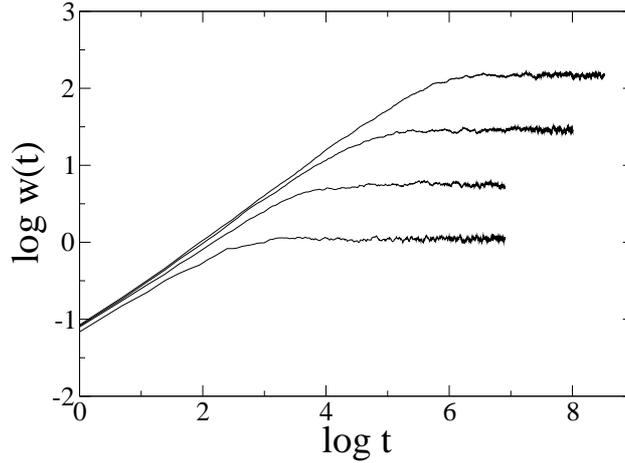


Figura 2.1: Dependência do tempo de saturação com o tamanho do depósito. As curvas de baixo para cima correspondem aos tamanhos $L = 8, 16, 32$ e 64 , respectivamente. Os dados são provenientes da resolução numérica da equação KPZ em $d = 2$.

O tempo de cruzamento também segue uma lei de potência com o tamanho do depósito (vide a figura 2.1):

$$\tau \sim L^z, \quad (2.6)$$

onde z é conhecido como expoente dinâmico.

Os três expoentes não são independentes entre si. A relação entre eles pode ser encontrada observando-se que, ao se aproximar de τ pela esquerda, tem-se $w(\tau) \sim \tau^\beta$ de (2.4). Se, no entanto, a aproximação for feita pela

direita $w_{sat}(\tau) \sim L^\alpha$. Como estes dois valores da rugosidade são da mesma ordem de grandeza (2.6), encontramos a *lei de escala*:

$$z = \frac{\alpha}{\beta} \quad (2.7)$$

Esta lei de escala é válida para qualquer processo de crescimento que siga a relação de escala de Family-Vicsek [4]:

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

onde $f(x) \sim x^\beta$ para x pequeno e $f(x) \sim cte$ para x grande.

A relação de Family-Vicsek pode ser obtida observando-se que, dividindo a rugosidade por seu valor de saturação w_{sat} e o tempo t pelo tempo característico τ , as curvas da rugosidade colapsam numa só, sugerindo assim que a razão $\frac{w}{w_{sat}}$ seja função apenas da razão $\frac{t}{\tau}$. Assim, substituindo w_{sat} de (2.5) e τ de (2.6) chega-se a relação de Family-Vicsek.

2.3 Princípios de simetria

Retomamos aqui a discussão iniciada na seção 2.1 de como determinar a forma de uma equação de crescimento.

A expressão de G na equação (2.1) pode ser determinada através de uma abordagem bastante ampla, que se baseia na seguinte premissa: a equação de crescimento deve ser a mais simples possível compatível com as simetrias do problema que ela esteja modelando.

As principais simetrias que uma equação de crescimento deve respeitar são [1]:

a) Invariância sob translação temporal: ou seja, a equação de crescimento não deve depender de onde seja definida a origem do tempo. Isto implica que a equação deve ser invariante frente a transformações $t \rightarrow t + \delta t$.

b) Invariância frente a translações na direção do crescimento. A equação deve independe da escolha de $h = 0$, o que equivale a dizer que deve haver invariância frente a transformações do tipo $h \rightarrow h + \delta h$

c) Invariância frente a translações na direção perpendicular ao crescimento. A equação não pode depender de um valor específico da posição \vec{x} . Logo, não podem haver alterações pela transformação $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \delta \vec{x}$.

Deve-se notar que as exigências a), b) e c) impedem que a forma de G tenha dependência explícita em h , \vec{x} e t .

As outras simetrias importantes são:

d) Simetrias frente a rotações e inversões em relação à direção de crescimento (transformações do tipo $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$). Esta condição exclui derivadas ímpares nas coordenadas espaciais como (∇h) , $\nabla(\nabla^2 h)$ e etc.

e) Simetria de reflexão, impondo que a equação seja invariante em relação a mudanças $h \rightarrow -h$, pois flutuações de altura da interface devem ser semelhantes com respeito à altura média. Como consequência dessa simetria, termos como $(\nabla h)^2$, $(\nabla h)^4$ e outras derivadas de ordem par são excluídas da expressão de G . Em muitos processos de crescimento importantes este tipo de simetria não é observado.

O termo $|\nabla h|^2$, por exemplo, não poderia entrar numa equação com esta simetria pois após a transformação $h \rightarrow -h$ a equação de crescimento

$$\frac{\partial h}{\partial t} = |\nabla h|^2$$

se transforma em:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = |\nabla h|^2,$$

quebrando assim a simetria.

2.3.1 Teoria linear: a equação de Edwards-Wilkinson (EW)

Levando em consideração todas as simetrias discutidas, a equação de crescimento mais geral possível é dada por [1]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = (\nabla^2 h) + (\nabla^4 h) + \dots (\nabla^{2n} h) + (\nabla^2 h)(\nabla h)^2 + (\nabla^{2k} h)(\nabla h)^{2j} + \eta(\vec{x}, t) \quad (2.9)$$

Em (2.9) j, k e n podem assumir qualquer valor inteiro positivo, e os coeficientes em frente a cada termo foram omitidos para fins de simplificação.

Como dissemos anteriormente, a equação contínua de crescimento deve ser a mais simples possível respeitando as simetrias do problema em questão. A equação (2.9) pode ser bastante simplificada se estivermos interessados somente em propriedades de escala, o que exige que olhemos o comportamento das funções que caracterizam a interface no regime hidrodinâmico ($t \rightarrow \infty$ $L \rightarrow \infty$). Neste regime, pode-se mostrar, de diferentes maneiras, que as derivadas de menor ordem são mais relevantes que as de ordem maior. Uma das maneiras possíveis é através de conceitos de escala. Assim, fazendo as transformações de auto-afinidade (para todas as superfícies que estamos tratando aqui, é assumido que estas são auto-afins [1]) $\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = b\vec{x}$ e $h \rightarrow h' = b^\alpha h$

teremos, por exemplo, para os termos $\nabla^2 h$ e $\nabla^4 h$, o resultado:

$$\nabla^2 h \rightarrow \nabla'^2 h' = b^{\alpha-2} \nabla^2 h, \quad (2.10)$$

$$\nabla^4 h \rightarrow \nabla'^4 h' = b^{\alpha-4} \nabla^4 h \quad (2.11)$$

Então no limite em que $b \rightarrow \infty$ o termo com $\nabla^4 h$ vai a zero mais rápido que o com $\nabla^2 h$, e por um raciocínio análogo pode-se mostrar que o termo $\nabla^2 h$ preponderará sobre os demais termos em (2.9). A expressão de G mais simples possível para este caso é dada pelo termo $\nabla^2 h$. Para chegar a versão final da equação basta ainda ser determinada a forma do ruído η . Novamente, a determinação deste fator deve levar em conta o fenômeno específico de crescimento que se queira modelar. Em sua forma mais simples, o ruído tem distribuição gaussiana com média nula e é descorrelacionado no tempo e no espaço. Estas duas condições costumam ser escritas como:

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \rangle = 0 \quad (2.12)$$

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t'), \quad (2.13)$$

onde D é chamada de amplitude do ruído.

Usando o ruído gaussiano acima com a G obtida chegamos à equação de Edwards-Wilkinson(EW) [5]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu (\nabla^2 h) + \eta(\vec{x}, t) \quad (2.14)$$

Na equação (2.14), o coeficiente ν é também conhecido como "tensão superficial", uma vez que $\nu\nabla^2 h$ tende a suavizar a interface, "redistribuindo" suas irregularidades mas mantendo a altura média inalterada, agindo assim como um mecanismo de relaxação conservativo.

Uma característica que deve ser observada na equação EW é que, para condições de contorno periódicas, a velocidade média da interface é nula [1]:

$$v = \int_0^L d^d x \left\langle \frac{\partial h}{\partial t} \right\rangle \quad (2.15)$$

Outro aspecto importante da equação EW é que ela é linear, e por isso seus expoentes podem ser calculados exatamente em qualquer dimensão [1].

2.4 A equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ)

A equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [6] é o modelo contínuo de crescimento de interfaces mais estudado até hoje. Esta equação surgiu como uma extensão da equação EW que fosse capaz de explicar satisfatoriamente o processo de crescimento de uma superfície onde haja crescimento numa direção localmente normal à interface, ocasionando assim um crescimento lateral, tal como em processos de deposição por vapor [7] e o modelo de Eden [8]. Kardar, Parisi e Zhang mostram então, por uma argumentação geométrica, que neste tipo de processo é necessário a inclusão de um termo não-linear na equação (2.14), tornando-a em:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu\nabla^2 h + \frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t). \quad (2.16)$$

Na equação (2.16) o coeficiente λ é também chamado de excesso de velo-

cidade, visto que agora a velocidade média da interface é:

$$v = \frac{\lambda}{2} \int_0^L d^d x \langle (\nabla h)^2 \rangle, \quad (2.17)$$

que é não nula. Diz-se que ν , λ e D (amplitude do ruído dada na eq. (2.13)) são os parâmetros da equação.

Uma consequência importante da inclusão do termo não-linear é que a simetria de reflexão $h \rightarrow -h$ (seção 1.3) é quebrada [1], posto que tal simetria não admite a presença de termos da forma $(\nabla h)^{2n}$ na equação de crescimento.

Outra propriedade importante da equação KPZ é que ela possui "invariância galileana". Isto implica que frente a uma transformação da inclinação parametrizada por um vetor \vec{u}_0 [9]:

$$h'(\vec{x}, t) = h(\vec{x} - \vec{u}_0 t, t) - \frac{1}{\lambda} \vec{u}_0 \cdot \vec{x} + \frac{1}{2\lambda} |\vec{u}_0|^2 t \quad (2.18)$$

a equação KPZ mantém sua forma original exceto pelo fato de o ruído ser deslocado para $\eta(\vec{x} - \vec{u}_0 t, t)$. Isso não altera a equação desde que as correlações sejam de curto alcance.

O nome *invariância galileana* é decorrente de esta propriedade ter sido verificada primeiramente [10] para a equação de **Burgers** [11], usada para descrever o comportamento de fluidos com agitação aleatória. A equação de Burgers é dada por [1]:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = \nu \nabla^2 \vec{u} - \lambda \nabla \eta \quad (2.19)$$

A equação KPZ pode ser mapeada na de Burgers através da transformação $\vec{u} = -\lambda \nabla h$. Neste caso, a transformação (2.18) equivale a:

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{u}_0 + \vec{u}(\vec{x} - \vec{u}_0 t, t) \quad (2.20)$$

A transformação (2.20) nada mais é que uma transformação galileana para a velocidade do fluido \vec{u} .

Valendo-se da relação entre a equação (2.16) e a de Burgers, Kardar, Parisi e Zhang utilizaram o formalismo de *grupo de renormalização dinâmico* desenvolvido por Foster, Nelson e Stephen [10] para a equação de Burgers, a fim de estudar as propriedades de escala da equação KPZ.

Aplicando a técnica de grupo de renormalização (RG, da sigla em inglês), as *equações de fluxo* que descrevem a mudança nos parâmetros da equação quando uma transformação de RG é aplicada são dadas por [1, 6]:

$$\frac{d\nu}{dl} = \nu \left[z - 2 + K_d g^2 \frac{2-d}{4d} \right] \quad (2.21)$$

$$\frac{dD}{dl} = D \left[z - d - 2\alpha + K_d \frac{g^2}{4} \right] \quad (2.22)$$

$$\frac{d\lambda}{dl} = \lambda [\alpha + z - 2] \quad (2.23)$$

Nas equações (2.21), (2.22) e (2.23), l é um parâmetro usado no processo de re-escala do sistema na aplicação do RG, $K_d \equiv \frac{S_d}{(2\pi)^d}$, onde S_d é a área superficial de uma esfera de raio unitário d -dimensional, e $g^2 = \frac{\lambda^2 D}{\nu^3}$ é denominada constante de acoplamento. Os expoentes de escala são obtidos procurando os pontos fixos das equações (2.21), (2.22) e (2.23), o que equivale a igualá-las a zero e encontrar os valores de α , z que satisfaçam essa condição. De (2.23) chegamos à seguinte condição:

$$z + \alpha = 2 \quad (2.24)$$

A relação (2.24) na verdade é decorrente da invariância galileana que a equação KPZ possui, e por isto é válida em qualquer dimensão.

Os parâmetros ν e D não re-escalam independentemente, por isso é necessário encontrar os pontos fixos da equação de fluxo para a constante de acoplamento para depois calcular os pontos fixos dos parâmetros. Usando as equações (2.21), (2.22) e (2.23) e a expressão de g , encontra-se para a constante de acoplamento a equação de fluxo [1]

$$\frac{dg}{dl} = \frac{2-d}{2}g + K_d \frac{2d-3}{4d}g^3 \quad (2.25)$$

Todavia, esta aproximação só permite a obtenção dos valores exatos dos expoentes em $d = 1$. Neste caso, encontra-se para (2.25) os pontos fixos $g_1^* = 0$ e $g_2^* = \sqrt{\frac{2}{K_d}}$. O ponto fixo nulo corresponde ao caso EW ($\lambda = 0$). Assim, substituindo g_2^* em (2.21) e (2.22) encontramos para os expoentes críticos os valores $\alpha = \frac{1}{2}$, $z = \frac{3}{2}$ e $\beta = \frac{1}{3}$.

Para $d = 2$, não há ponto fixo diferente de zero para g . Neste caso, o ponto fixo é determinado por um comportamento de acoplamento forte, e não pode ser calculado via teoria de perturbação.

Para $d > 2$ há um ponto fixo não nulo g^* , porém repulsivo. Assim, para valores de g menores que g^* (regime de acoplamento fraco), a constante de acoplamento vai para zero, ou seja, o crescimento é descrito pela equação EW. Para valores de g maiores que g^* (regime de acoplamento forte), a constante de acoplamento "flui" para o infinito, indicando que deve haver um outro comportamento de escala que não pode ser acessado via teoria de perturbação, e neste caso os expoentes devem ser calculados numericamente.

Um aspecto interessante aqui é a perspectiva da ocorrência de uma transição de fases entre a teoria linear ($g < g^*$, com ponto fixo $g = 0$) e o regime de acoplamento forte ($g > g^*$) à medida que o valor de g for aumentado.

Por fim, discutimos uma última propriedade da equação KPZ, válida apenas para $d = 1$, que é responsável, junto com a invariância galileana pela solução exata dos expoentes de escala naquela dimensão.

Considere uma equação de Langevin [12] geral:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = G(h) + \eta(t) \quad (2.26)$$

com ruído apresentando correlações do tipo $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = D\delta(t - t')$. À equação (2.26) pode-se associar uma equação de Fokker-Planck que descreve a evolução de $P(h, t)$, onde $P(h, t)$ é a probabilidade de um ponto da superfície ter altura h no instante t [1]:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial h}[G(h)P] + D\frac{\partial^2 P}{\partial h^2} \quad (2.27)$$

Para o caso específico da equação KPZ, as alturas h dependem da posição \vec{x} , e por isso a equação de Fokker-Planck neste caso se escreve como [1, 9]:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\int dx \frac{\delta}{\delta h} \left[\left(\nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} \right) P \right] + D \int dx \frac{\partial^2 P}{\partial h^2} \quad (2.28)$$

Para condições de contorno periódicas, mostra-se que a integral do termo não-linear é nula [9], sendo então possível encontrar uma solução estacionária para a equação (2.28) que é dada por [1, 9]:

$$P = \exp \left(-\frac{\nu}{2D} \int (\partial_x h)^2 dx \right) \quad (2.29)$$

O resultado (2.29) equivale a dizer que em 1 dimensão para a equação KPZ o teorema da *flutuação-dissipação* é válido. A consequência deste resultado

é que o expoente de rugosidade pode ser calculado diretamente de (2.29), pois como podemos ver as inclinações locais ∇h seguem uma distribuição gaussiana, isto é, são aleatórias e decorrelacionadas. A interface é obtida considerando-se inclinações sucessivas, e a própria interface pode ser vista como a trajetória de uma partícula em movimento Browniano [1]. Deste fato segue $\alpha = \frac{1}{2}$, e de acordo com as relações (2.7) e (2.24) encontra-se $\beta = \frac{1}{3}$ e $z = \frac{3}{2}$, exatamente como obtido por RG.

2.5 Modelos discretos

Abrimos uma exceção neste capítulo que trata de equações contínuas para falar de uma outra classe de modelos, os modelos discretos, que também são ferramentas muito úteis no estudo da Física de superfícies.

Os modelos discretos são modelos que representam o processo de crescimento numa rede composta por L^d sítios, onde L é a aresta do hipercubo que define a rede. Neste caso, a altura de um dado sítio é modificada de acordo com uma "regra de crescimento", que varia de acordo com o fenômeno específico sob estudo. A escolha do sítio cuja altura será modificada é em geral aleatória. Costuma-se definir para estes modelos uma unidade de tempo como sendo aquela em que haja deposição de L^d partículas.

Modelos discretos e equações contínuas tem uma forte ligação pois cada equação contínua define uma classe de universalidade, e dentro de cada classe vários modelos discretos estão englobados.

Devido à dificuldade de se obter resultados exatos para os expoentes de escala analiticamente a partir das equações contínuas, uma saída para isso é

então fazer o cálculo através de simulações dos modelos discretos.

Daremos exemplo de dois modelos discretos que acredita-se pertencerem à classe KPZ.

O primeiro deles é o modelo de deposição balística [7]. Para este a regra de deposição é a seguinte: um sítio é escolhido aleatoriamente. Uma partícula é então liberada de uma posição verticalmente acima deste sítio e se agrega ao primeiro contato com a superfície como na figura 2.2.

O segundo modelo é o chamado sólido sobre sólido restrito (RSOS, da sigla em inglês) [13]. Para este, a regra de deposição é: um sítio é escolhido aleatoriamente, sua altura é incrementada de uma unidade, desde que seja satisfeita a condição $|\Delta h| = 0$ ou 1 entre o sítio selecionado e seus primeiros vizinhos. Caso contrário, a altura não é modificada (ver figura 2.3).

Um outro método numérico importante é a integração numérica das equações contínuas de crescimento. Este método será discutido mais a fundo no próximo capítulo para o caso específico da equação KPZ.

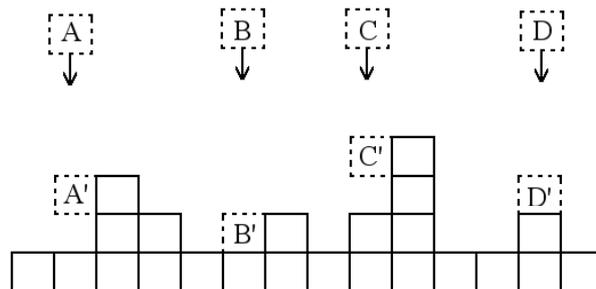


Figura 2.2: Ilustração do processo de crescimento para o modelo DB.

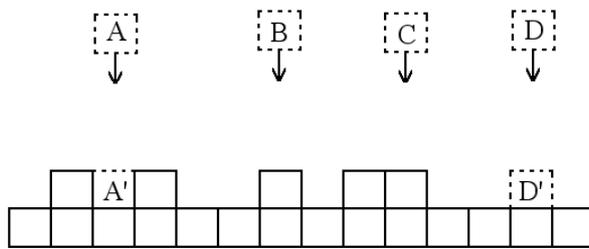


Figura 2.3: Ilustração do processo de crescimento para o modelo RSOS. Note que a adição das partículas B e C à superfície é rejeitada, pois isto violaria as regras de crescimento do modelo.

Capítulo 3

Integração numérica da equação KPZ.

Equações diferenciais parciais (**EDP**) são de difícil tratamento analítico, porém em alguns casos particulares é possível obter-se uma solução analítica. No nosso caso, a situação é das mais complexas possíveis, pois a equação KPZ além de ser parcial é ainda não-linear e estocástica. Infelizmente não há uma solução analítica para ela. Para poder resolvê-la faz-se então necessário o uso de métodos numéricos, que mesmo assim apresentam dificuldades. Neste capítulo, discutiremos os principais métodos de *integração numérica* para a equação KPZ.

3.1 Método de diferenças finitas.

Este é o método mais comum para integração numérica de EDP, e pode ser encontrado em qualquer livro de cálculo numérico, em geral com exemplos para equação de transmissão do calor.

No método de *diferenças finitas*, derivadas de um certo campo ϕ são computadas truncando-se a série de Taylor do campo após certa ordem.

De uma maneira mais formal, podemos escrever os resultados do método da seguinte forma, usando a linha de Gallego et al [14].

Considere uma rede d -dimensional, com espaçamento uniforme Δx em cada direção. As posições dos nós da rede são dadas pelo produto deste espaçamento pelo vetor de coordenadas (j_1, j_2, \dots, j_d) :

$$\vec{x}_j = \Delta x(j_1, j_2, \dots, j_d), \quad 0 \leq j_i \leq L_i - 1, \quad 1 \leq i \leq d. \quad (3.1)$$

onde L_i é o número de nós da rede na direção i ($L_i \Delta x$ é o tamanho da rede nesta direção), e d é a dimensão da rede. Consideremos ainda $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_d$ como os vetores base canônicos.

Sendo assim, o método de diferenças finitas dá para as derivadas temporal e espacial as seguintes discretizações:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{h(\vec{x}_j; t + \Delta t) - h(\vec{x}_j; t)}{\Delta t} + o(\Delta t), \quad (3.2)$$

$$\nabla^2 h = \frac{1}{(\Delta x)^2} \sum_{i=1}^d [h(\vec{x}_j + \vec{e}_i \Delta x) - 2h(\vec{x}_j) + h(\vec{x}_j - \vec{e}_i \Delta x)] + o(\Delta x^2). \quad (3.3)$$

Por fim,

$$(\nabla h)^2 = \frac{1}{(\Delta x)^2} \sum_{i=1}^d \frac{[h(\vec{x}_j + \vec{e}_i \Delta x) - h(\vec{x}_j - \vec{e}_i \Delta x)]^2}{4} + o(\Delta x^2). \quad (3.4)$$

Para encurtar a notação em (3.3) e (3.4) omitimos a variável t no argumento dos h 's que indica que as alturas são calculadas no instante t .

Uma forma mais compacta para estas expressões é obtida [14] fazendo-se uso de operadores de diferença adiantado Δ_i^a , e retardado Δ_i^r , ao longo da direção i , que são definidos como:

$$\Delta_i^a h(\vec{x}_j; t) = h(\vec{x}_j + \vec{e}_i \Delta x; t) - h(\vec{x}_j; t) \quad (3.5)$$

$$\Delta_i^r h(\vec{x}_j; t) = h(\vec{x}_j; t) - h(\vec{x}_j - \vec{e}_i \Delta x; t) \quad (3.6)$$

Daí em termos destes operadores:

$$(\nabla^2 h)(\vec{x}_j; t) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \sum_{i=1}^d \Delta_i^a \Delta_i^r h(\vec{x}_j; t) \quad (3.7)$$

$$(\nabla h)^2(\vec{x}_j; t) = \frac{1}{4(\Delta x)^2} \sum_{i=1}^d [(\Delta_i^a + \Delta_i^r)h(\vec{x}_j; t)]^2 \quad (3.8)$$

A equação discreta pode então ser escrita como

$$\begin{aligned} h(\vec{x}_j; t + \Delta t) - h(\vec{x}_j; t) &= \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \sum_{i=1}^d \{ \nu \Delta_i^a \Delta_i^r h(\vec{x}_j; t) + \frac{\lambda}{8} [(\Delta_i^a + \Delta_i^r)h(\vec{x}_j; t)]^2 \} + \\ &+ \left[\frac{2D\Delta t}{(\Delta x)^d} \right]^{\frac{1}{2}} \sqrt{12} R_n(t), \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde $R_n(t)$ são números aleatórios vindos de uma distribuição uniforme entre $-0,5$ e $0,5$ e D é a amplitude do ruído da equação KPZ (2.16). Este último termo garante que o ruído tem média zero e variância $2D$, como definido originalmente. Por isso a multiplicação pelo fator $\sqrt{12}$. O fator $\left[\frac{2D\Delta t}{(\Delta x)^d} \right]^{\frac{1}{2}}$ assegura que a dimensão do ruído também será como no caso de origem. Vale a pena ressaltar que o ruído não é restrito apenas a uma distribuição uniforme, ele pode vir de qualquer distribuição que obedeça ao “Teorema

central do Limite“ [15], devendo-se cuidar apenas que o fator multiplicativo que garantirá a variância correta em cada caso irá variar de acordo com a distribuição escolhida.

3.1.1 A escolha dos incrementos espacial e temporal.

Como o erro nas aproximações das derivadas são da ordem do tamanho dos passos Δx e Δt , pode-se pensar que quanto menor o valor destes parâmetros melhores serão as soluções obtidas. Todavia, aqui o caso não é exatamente assim.

De fato, o passo temporal deve ser diminuído até o ponto em que o seu decréscimo não mais alterará os resultados que aparecem com um passo um pouco menor.

Já para o caso espacial, o comportamento é diferente. Para este usa-se, em geral, $\Delta x = 1$. O efeito de tornar Δx menor é apenas fazer com que o termo não-linear da equação seja reduzido. Qualquer valor de Δx pode sempre ser feito igual a 1 através da série de transformações $x' \rightarrow (\Delta x)^{-1}x$, $t' \rightarrow (\Delta x)^{-1}t$, $h' \rightarrow (\Delta x)^{-1}h$ [16], que deixam a equação KPZ invariante exceto pelo fato de o coeficiente λ ser substituído por $\lambda(\Delta x)^{\frac{1}{2}}$. Assim, não é interessante fazer Δx decrescer indefinidamente, visto que isto reduziria demais a não-linearidade do sistema, e desta forma, tornaria muito difícil a observação de propriedades da classe KPZ num tempo de simulação razoável. O melhor procedimento é, então, trabalhar com $\Delta x = 1$ e redes grandes (L_i s grandes)

3.2 Anomalias com as integrações numéricas da equação.

3.2.1 Instabilidades.

O método de diferenças finitas é o mais simples para se conseguir uma versão discreta da equação KPZ. No entanto, o modelo mais simples nem sempre é capaz de tratar de modo correto a equação em questão. Isto é o que se dá aqui, principalmente à medida que a magnitude da não-linearidade aumenta. Moser et al [17] já observam a ineficácia do método para $d = 3$, atribuindo este acontecimento a instabilidades numéricas. Posteriormente, Dasgupta et al [18] voltaram a observar instabilidades na versão discreta da equação em uma dimensão. O problema encontrado durante as simulações era que, a partir de um determinado instante, surgiam picos isolados na superfície e estes picos cresciam muito à medida que o tempo evoluía. Num curto intervalo, eles chegam a um valor tão extremo que é impossível prosseguir com as simulações devido a um overflow da variável altura (ver a figura 3.1). Ao contrário do que se podia imaginar, Dasgupta et al [18] mostram que estas instabilidades não são devidas à escolha de um valor Δt inadequado. A diminuição do valor não soluciona o problema, ou seja, as instabilidades são intrínsecas à equação de crescimento discretizada.

Dasgupta et al [18] estudaram a versão discreta de alguns modelos contínuos não-lineares, tais como as equações KPZ e LD [19, 20, 21] (a denominação mais conhecida da equação é VLDS, mas usaremos a denominação LD para

ficar consistente com a usada em [18]), definida como:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nu_1 \nabla^4 h + \lambda_1 (\nabla^2 |\nabla h|^2) + \eta(\vec{x}, t), \quad (3.10)$$

onde o ruído η tem a mesma definição que para a equação KPZ.

Foi observado pelos autores que a ocorrência das instabilidades era um fenômeno comum a estes modelos. O tempo em que as instabilidades começavam a aparecer variava bastante de uma simulação para a outra, mas em média diminuía quando o valor de λ era aumentado.

Para entender melhor a natureza destas instabilidades, Dasgupta et al [18] estudaram dois casos distintos. Primeiro, realizaram simulações nas quais a condição inicial do sistema era $h_i = 0$ para todo i , exceto no centro da superfície, onde $h_i = h_0$ (no caso da equação KPZ, na verdade os autores

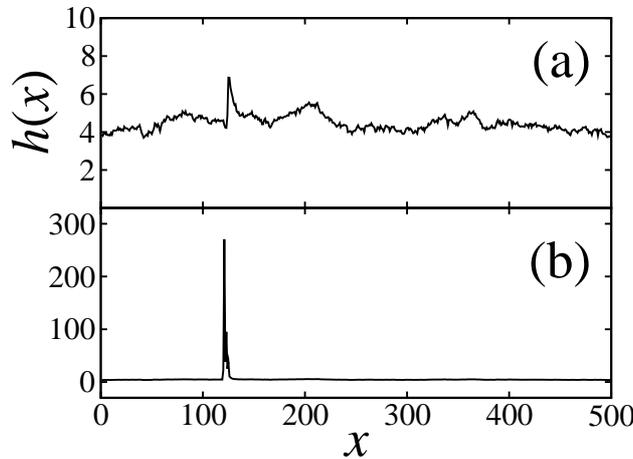


Figura 3.1: Perfis de uma interface em $d=1$ obtidas a partir da integração numérica da equação KPZ, usando a equação 3.9, nos instantes (a) $t = 55.5$ e (b) $t = 55.8$. Note a diferença na escala vertical em (a) e (b) devido ao rápido crescimento de uma instabilidade em $x \approx 120$

observaram ao invés de picos, fendas. Por isso para observar as instabilidades eles fizeram $h_0 < 0$, o que equivale a uma fenda na superfície). Então, para valores de h_0 distintos calcularam a probabilidade de uma instabilidade surgir no sistema induzida por esta fenda (ou pico para a equação LD). A probabilidade de ocorrência de uma instabilidade foi definida como a razão entre o número de depósitos simulados em que a diferença na altura entre os primeiros vizinhos exceda o valor 1000 até o tempo t , e o total de depósitos simulados. A figura 3.2 mostra a probabilidade de ocorrência de uma instabilidade para 3 valores distintos de h_0 . Deve-se notar que, no limite de tempos grandes, a probabilidade tende a uma constante. No trabalho, foi estudado o caso da equação KPZ com e sem ruído, e os autores afirmam que os resultados encontrados foram semelhantes. Com o intuito de mostrar a dependência da ocorrência das instabilidades com o valor de λ , definiu-se uma altura crítica h_c , onde a probabilidade de aparecimento de um pico no limite de tempos grandes é igual a 0.5. A figura 3.3 mostra a dependência de h_c com λ para as equações KPZ e LD, comprovando que o aumento de λ faz com que as instabilidades apareçam mais facilmente.

O fato de a versão sem ruído da equação KPZ discreta apresentar estas instabilidades é surpreendente, pois a sua versão contínua pode ser resolvida exatamente para qualquer condição inicial limitada, em qualquer dimensão. A solução exata foi obtida por Kardar, Parisi e Zhang [6] pois os autores observaram que aplicando uma transformação de Hopf-Cole ($W(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{\lambda}{2\nu}h(\vec{x}, t)\right)$), a equação KPZ (2.16) é transformada em:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \nu \nabla^2 W + \frac{\lambda}{2\nu} \eta(\vec{x}, t) W, \quad (3.11)$$

que é a equação de difusão para um potencial aleatório dependente do tempo. No caso determinístico ($\eta(\vec{x}, t) = 0$) a equação (3.11) pode ser resolvida exatamente para qualquer condição inicial limitada e sua solução não apresenta nenhuma instabilidade [6]. Esta observação levantou discussões interessantes acerca de as equações contínuas e discretas pertencerem à mesma classe de universalidade [16, 18]. Dasgupta et al lembram que alguns modelos atomísticos como o modelo RSOS, que acredita-se pertencer à classe KPZ, bem como outros modelos atomísticos na classe LD, não apresentam ne-

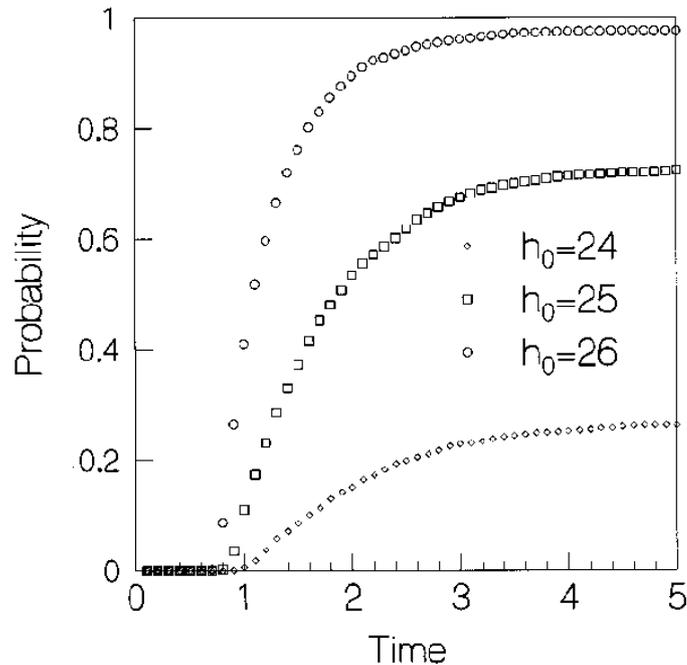


Figura 3.2: Probabilidade de uma instabilidade ocorrer até o tempo t , induzida por um pico de altura h_0 para a equação KPZ discreta em 1 dimensão, como função do tempo. Os valores de h_0 testados foram iguais a 24, 25 e 26. Extraído de [18].

nhuma instabilidade do tipo considerado aqui (isso é claramente visto para o RSOS, pois a altura entre os vizinhos mais próximos não pode exceder 1). Estes resultados, porém, não são suficientes para garantir que as equações contínuas não apresentem instabilidades. Já que no limite hidrodinâmico, onde os modelos discretos são representados pelas equações contínuas, estes modelos devem diferir das equações originais pela presença de termos irrelevantes. Todavia, pode ser justamente a presença destes termos a responsável por tornar os modelos atomísticos estáveis, como veremos adiante quando apresentarmos um método aperfeiçoado para controlar as instabilidades na

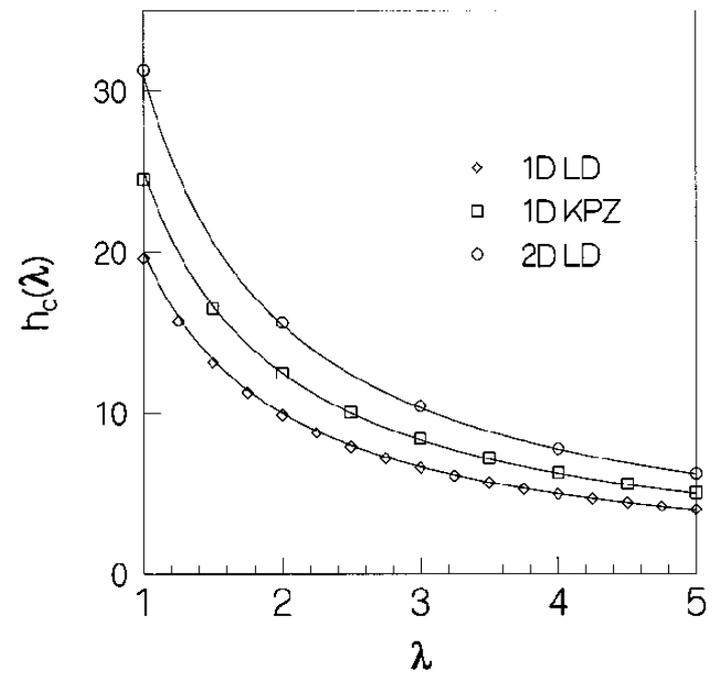


Figura 3.3: Dependência de h_c com λ , para a equação LD discretizada em 1 e 2 dimensões, e para a equação KPZ discretizada em 1 dimensão. Extraído de [18].

equação KPZ discretizada. A possibilidade de as versões contínua e discretizada da equação de crescimento apresentarem comportamentos distintos traz à luz a questão de qual dos dois modelos é mais fundamental. Não há uma resposta definitiva para isso, mas também não pode-se afirmar que a versão discretizada seja menos fundamental que a contínua, pois é possível até que a versão discretizada esteja mais próxima da física real dos processos de crescimento, se levarmos em conta que no limite atômico todo processo de crescimento é discreto. Também existe a chance de sob certas condições, como altos valores da não-linearidade g , as aproximações feitas acerca da suavidade do perfil das alturas da interface, necessárias para a derivação da equação de crescimento contínua deixem de ser válidas. Segundo [16] os perfis da superfície realmente são muito sinuosos ao nível microscópico e isto torna as aproximações das derivadas inválidas. Indagações como estas deixam em aberto a questão de as equações contínuas e discretizadas pertencerem ou não à mesma classe de universalidade [18].

Prosseguindo no estudo das instabilidades, o passo seguinte dado por Dasgupta et al foi observar se estas instabilidades surgiam naturalmente no sistema sem serem induzidas por uma coluna com altura não nula no início do processo de crescimento. Para que o sistema exiba naturalmente este comportamento anômalo é preciso que durante o processo de crescimento, a diferença máxima, s_{max} , entre primeiros vizinhos exceda um valor crítico h' :

$$s_{max} = \max\{s_i\}, \quad (3.12)$$

onde

$$s_i = \left\{ \left[h(\vec{x}_i + \vec{i}\Delta x) - h(\vec{x}_i) \right]^2 + \left[h(\vec{x}_i + \vec{j}\Delta x) - h(\vec{x}_i) \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.13)$$

Espera-se que h' diminua com λ e s_{max} cresça com λ . Defini-se então um valor crítico λ_c no qual $s_{max} = h'$. Daí, supõe-se que sistemas com λ muito menores que λ_c não apresentem instabilidades. Pela figura 3.4 podemos notar a dependência do tempo de aparecimento de uma instabilidade τ_{ins} , em um sistema inicialmente “plano”, com λ . Defini-se τ_{ins} como sendo o tempo em que s_{max} atinge o valor de corte 1000.

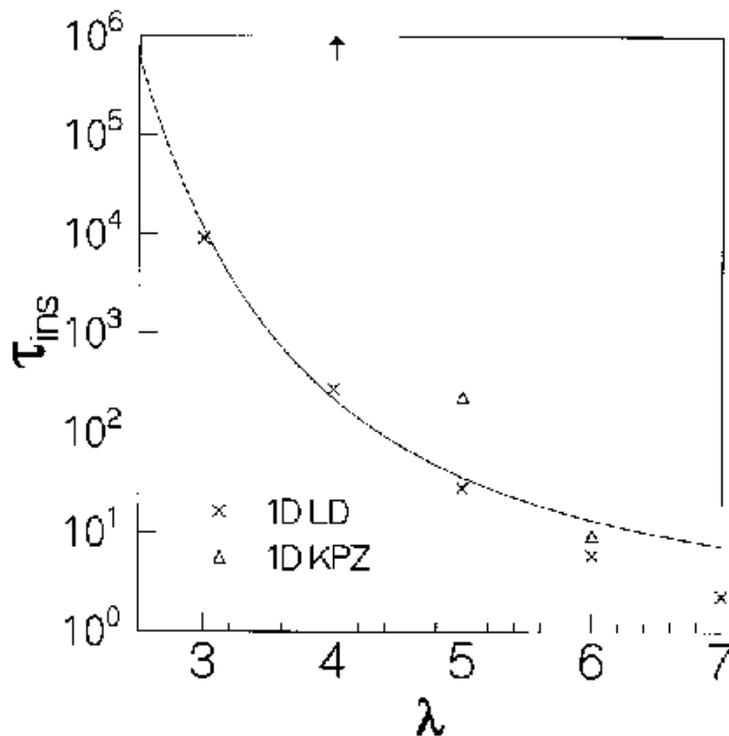


Figura 3.4: Tempo médio até o aparecimento de uma instabilidade τ_{ins} como função de λ , para a versão discreta da equação KPZ em 1D. Extraído de [18].

O surgimento natural das instabilidades para um sistema inicialmente liso foi constatado, acontecendo mais facilmente quando λ é maior.

3.2.2 Inconsistência entre os parâmetros da equação discreta e contínua.

Além do problema relatado acima, a versão discretizada da equação obtida pelo uso de diferenças finitas apresenta uma outra anomalia: os parâmetros usados na forma discreta não são consistentes com os da versão contínua da equação, como Lam e Shin descobriram em [16].

Lam e Shin lembram que no caso unidimensional, a largura da interface no estado estacionário é conhecida exatamente e dada por [22]:

$$w_{sat} = \left(\frac{A}{12} \right)^{1/2} L^\alpha \quad (3.14)$$

A constante “ A ” na expressão (3.14) é uma amplitude de escala dada por $A = \frac{D}{\nu}$. Os autores simularam a equação para 2 casos, em ambos tomando $D_0 = \nu_0 = 1$. Porém, num deles $\lambda_0 = 0$ e no outro $\lambda_0 = 3$. (Nesta seção utilizaremos os subíndices $\mathbf{0}$ para denotar os valores dos parâmetros usados na versão discretizada da equação, por motivo de clareza e para ficar com uma notação consistente àquela utilizada em [16], de onde extraímos os resultados desta discussão). Surpreendentemente, para $\lambda_0 = 3$ encontrou-se $A = 0.879$, como mostra a figura (3.5), na qual vários valores de Δt foram testados. Isto comprova que o problema também é intrínseco à equação discreta, não podendo ser eliminado simplesmente por um artifício numérico de diminuir o valor do passo temporal. De maneira a corroborar os resultados para A , Lam e Shin calcularam A por um método alternativo. Eles usaram a função

de correlação

$$C(r) = \langle [h(x+r) - h(x)]^2 \rangle \quad (3.15)$$

que, em $d=1$, escala como $C(r) = Ar^{2\alpha}$ para $\Delta x \ll r \ll \xi$, onde ξ é o comprimento de correlação que especifica a escala abaixo da qual as flutuações já saturaram, e cujo valor é limitado tanto pelo tempo, quanto pelo tamanho do sistema. A figura 3.6 mostra que os resultados encontrados por este método concordam bastante com o do caso anterior.

Para determinar então os valores efetivos de λ , ν e D correspondentes a uma simulação com $\lambda_0 = 3$ e $\nu_0 = D_0 = 1$, Lam e Shin recorrem ao método inverso proposto por Lam e Sander [25], que consiste em gerar perfis de superfícies a partir da equação KPZ discretizada, e analisar quais os parâmetros da versão contínua da equação que seriam mais adequados para gerar aqueles

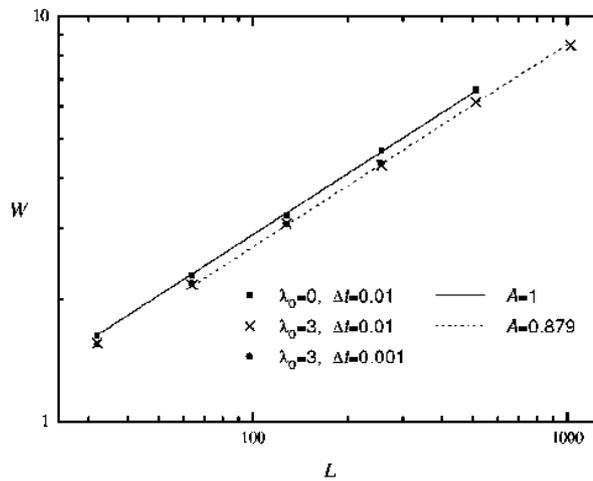


Figura 3.5: Largura da interface W contra o tamanho do depósito L , para $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_0 = 3$. Extraído de [16]. (Note que os autores denotaram a rugosidade no estado estacionário por W ao passo que nós usamos w_{sat} .)

perfis. Após aplicação do método, os autores encontraram $\lambda = \lambda_0$, $D = D_0$ e $\nu \approx 1.14 \neq \nu_0$. Em outras palavras, a simulação gera uma interface com valor efetivo de ν (tensão superficial) superior àquele que foi estabelecido na discretização da equação KPZ original. Substituindo os valores de D e ν obtidos, encontra-se $A = \frac{D}{\nu} \approx 0.877$, muito próximo ao que foi achado para A nas simulações.

Notou-se ainda que este problema não é exclusivo apenas da versão discreta da equação KPZ derivada em (3.9). Outros métodos de discretização foram testados e apresentaram o mesmo problema [23, 24].

A ocorrência da anomalia está ligada ao fato de a superfície ser rugosa ao nível microscópico. Lam e Shin argumentam que neste caso, devido à discretização, o erro esperado é da ordem de $(\Delta x)^2$, que dá uma aproximação boa para uma função $h(x, t)$ suave, mas que não é o caso da superfície KPZ.

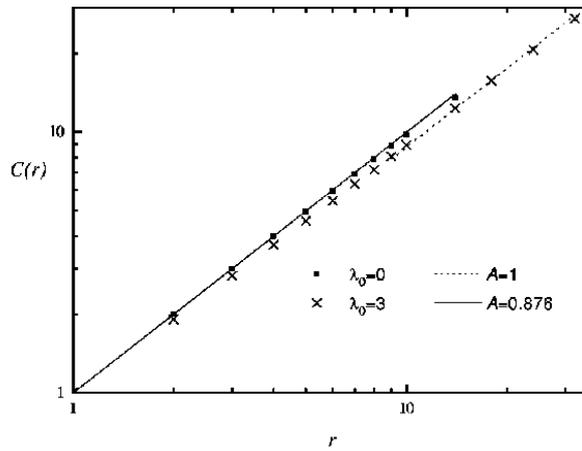


Figura 3.6: Função de correlação para os casos $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_0 = 3$. Extraído de [16].

Logo, as soluções aproximadas são muito imprecisas.

Uma outra questão emergente destas discussões é: se não é possível garantir que os parâmetros da equação discretizada sejam equivalentes aos da contínua, o que garante que a versão discretizada que estejamos simulando realmente represente a equação contínua? Em outras palavras, há uma chance de após a realização de simulações para uma determinada equação discretizada, ao aplicar-se um método inverso para determinação dos parâmetros da equação contínua como os desenvolvidos em [25, 26, 27], encontre-se um valor não nulo para o coeficiente de um termo que originalmente não estaria previsto na equação contínua, podendo implicar, por exemplo, que a versão discretizada esteja representando uma classe de universalidade distinta da que se propõe.

Amar e Family [28] estudaram versões discretas de equações do tipo KPZ com um termo não-linear generalizado $|(\nabla h)|^\mu$, e para o caso $\mu = 4$, encontraram um comportamento da rugosidade típico de uma dinâmica KPZ. Entretanto, isto está em contradição ao que prevê a teoria, pois no limite hidrodinâmico este termo não-linear é irrelevante, e espera-se que a dinâmica seja caracterizada por expoentes de escala EW [5]. Isto significa que a forma discreta não é fiel ao caso contínuo e, provavelmente, atribui um valor não nulo para o coeficiente de $|\nabla h|^2$ que não aparece na equação simulada
$$\left(\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} |(\nabla h)|^4 + \eta(\vec{x}, t) \right).$$

3.3 Discretizações aperfeiçoadas da equação KPZ

Falaremos aqui de alguns métodos desenvolvidos para contornar os problemas mencionados na seção 3.2.

Primeiro, abordaremos o problema das instabilidades. Como estas estão associadas ao termo não-linear $|\nabla h|^2$, Dasgupta et al [18] propuseram um método que substitui este termo da equação discretizada (3.9) por $f(x) \equiv \frac{(1 - \exp(-cx))}{c}$, onde $x \equiv |\nabla h|^2$ e c é um parâmetro ajustável. Assim, se ocorrer um pico muito grande, a exponencial se aproxima de zero e a parte não-linear da equação contribui com $\frac{1}{c}$ para o incremento da altura do pico em vez de $|\nabla h|^2$ que é muito grande. O termo linear dará uma contribuição negativa (a derivada segunda no pico é negativa). Isto impede que o pico cresça indefinidamente. Deve-se notar que, quando x é pequeno, $f(x) \approx x$, ou seja, temos a equação original. O valor de c deve ser ajustado com o valor de λ ; quanto maior λ maior deve ser c . Para um dado λ as instabilidades são canceladas sempre que c é maior que um valor crítico. Observou-se [18] que quando c está abaixo deste valor crítico, há a chance de ocorrência de uma instabilidade, se um pico isolado é induzido na superfície com uma determinada altura h_0 dentro de uma faixa $h_{min} < h_0 < h_{max}$. Para valores de c menores, essa faixa de valores se torna maior.

Embora o uso de $f(x)$ introduza infinitos termos da forma $|\nabla h|^{2n}$, estes termos não influenciam os valores dos expoentes de escala, pelo fato de estes serem obtidos no limite hidrodinâmico, onde os termos de ordem $n > 1$ são desprezíveis frente ao $|\nabla h|^2$ [1].

Em trabalho recente [29], mostramos que esta discretização controla as instabilidades e ainda dá o valor correto da amplitude A . Os resultados serão apresentados no capítulo 4.

Gallego et al [14], utilizando o método pseudo-espectral, que resolve a equação KPZ no espaço dos momentos, descobriram que esta aproximação reduz a probabilidade de ocorrência de uma instabilidade com a diminuição de Δt . O "problema" deste método é que valores de λ maiores exigem Δt menores, elevando assim o custo computacional das simulações. Constatou-se também que este método era capaz de corrigir o problema da inconsistência entre os parâmetros da equação discretizada e a contínua.

Outras formas de discretização, que se diziam melhores que a de diferenças finitas usual, foram desenvolvidas por Beccaria e Curci [23], que resolveram a equação de difusão obtida da equação KPZ após uma transformada de Hopf-Cole (3.11), e por Newman e Bray [24]. Nas duas, o problema da inconsistência foi observado [16]. Outra discretização interessante, capaz de resolver esta dificuldade em 1 dimensão foi desenvolvida por Lam e Shin [30]. A forma é idêntica à da equação (3.9) salvo que agora o termo não-linear é discretizado como:

$$\frac{1}{3} [(h_{i+1} - h_i)^2 + (h_i - h_{i-1})(h_{i+1} - h_i) + (h_i - h_{i-1})^2] \quad (3.16)$$

Esta forma é interessante por dois motivos. Primeiro, dá o valor correto dos parâmetros da equação contínua obtidos pelo método inverso [25]. Segundo, é possível obter uma solução exata para a distribuição de alturas discreta no estado estacionário, que é independente do valor de λ , como se espera para o caso em $d=1$ contínuo. Uma deficiência desta discretização é que os

autores a construíram baseados em propriedades específicas da equação KPZ em $d=1$ (a existência de uma distribuição de alturas no estado estacionário independente de λ), propriedades estas que não são válidas para dimensões maiores, e por isto a generalização para estas dimensões não é possível.

Capítulo 4

Estudo numérico da equação

KPZ

A motivação deste trabalho, a forma de discretização por nós utilizada e os resultados obtidos com o estudo numérico da equação KPZ em $d = 1$ e $d = 2$ serão apresentados. Como veremos, em $d = 1$ os principais problemas com a discretização da equação KPZ puderam ser resolvidos. Em $d = 2$, confirmaremos a universalidade das distribuições de alturas e rugosidades e daremos estimativas para os expoentes de rugosidades.

4.1 Motivação

Desde seu surgimento, a equação KPZ levantou muitas questões interessantes para as quais ainda não se tem uma solução definitiva. No artigo de origem da equação [6] o interesse dos autores estava na determinação dos expoentes de escala, e obtiveram êxito na determinação exata destes valores em $d=1$. Como já discutimos no capítulo 2, as técnicas de RG não foram capazes de determinar o valor dos expoentes para $d \geq 2$. A determinação precisa dos expoentes é importante para se identificar uma determinada classe de universalidade. Quando um expoente é medido num experimento em laboratório é importante saber o valor teórico para poder dizer se de fato aquele processo de crescimento é descrito pela equação KPZ ou qualquer outra equação de crescimento. Devido a isto, devotou-se grande esforço em determinar precisamente os expoentes através de simulações computacionais. As duas abordagens principais foram: i) simulações computacionais de modelos discretos na classe KPZ; ii) Integração numérica da equação KPZ. Em $d=2$, as simulações com modelos discretos dão para o expoente α valores entre 0.37 e 0.4 [13, 31, 32, 33, 34]. Embora os primeiros trabalhos de integração direta da equação KPZ tenham encontrado para o expoente α valores como 0.18 [35] e 0.24 [36], trabalhos posteriores como [17, 23, 37] e resultados mais recentes [14], corroboram as estimativas de α em torno de 0.4. Há inclusive um resultado "analítico aproximado" devido a Lässig [38] que dá como possível valor, em $d=2$, $\alpha = 0.4$.

Mais recentemente, passou-se a dar atenção a outras grandezas para caracterização de classes de universalidade em processos de crescimento, como a

distribuição de alturas no estado estacionário e a distribuição de rugosidades no estado estacionário [39, 40, 41, 42, 43]. No caso específico da distribuição de alturas, a curtose e o coeficiente de assimetria são as grandezas mais usadas para caracterizá-la. Estudos com modelos discretos na classe KPZ obtiveram em $d \geq 2$ a curtose e o coeficiente de assimetria da distribuição de alturas, que na classe KPZ são universais, como esperado [2, 34, 44]. No caso de maior interesse prático, $d = 2$, simulações com modelos discretos na classe KPZ forneceram distribuições de rugosidade ao quadrado precisas [42].

Como a derivação da conexão entre modelos discretos e equações contínuas não pode ser obtida de maneira formal, é desejável então que estas conjecturas sejam tratadas diretamente através da resolução numérica da própria equação KPZ. A presente dissertação tem como objetivo principal preencher esta lacuna integrando numericamente a equação KPZ, e a partir de uma variação sistemática de seus parâmetros, obter as distribuições de alturas e rugosidade, no estado estacionário, verificando se os resultados confirmam os já encontrados com os modelos discretos.

4.2 Discretização da equação

No capítulo 3 discutimos a fundo os principais problemas encontrados na discretização da equação KPZ, que são as instabilidades relacionadas a picos que surgem na interface e crescem subitamente impedindo o prosseguimento das simulações, e a inconsistência entre os parâmetros das equações contínua e discreta. Embora o nosso maior interesse seja no caso bidimensional, analisamos a equação KPZ em $d = 1$ para mostrar que a discretização por nós

adotada é capaz de resolver estes problemas.

Nosso estudo numérico começou com a análise da discretização usual (3.9) e verificamos que esta forma era insatisfatória, como esperado. Avaliamos então a discretização desenvolvida em [18], que é análoga à dada em (3.9) exceto que agora o termo não-linear é substituído pela função de correção $f(x) = \frac{1}{c}(1 - \exp(-cx))$, onde $x \equiv |\nabla h|^2$, e $|\nabla h|^2$ é discretizado como na equação (3.4). Como veremos na próxima seção, esta representação não só controla as instabilidades, como também resolve o problema da inconsistência entre os parâmetros simulados e efetivamente obtidos nos resultados.

No estudo em $d = 2$, usaremos a equação discretizada com a função de correção $f(x)$. Analizaremos quatro conjuntos de parâmetros distintos. Em nossa análise, ao invés de variarmos diretamente o valor de cada um dos parâmetros, modificaremos apenas o valor da constante de acoplamento $g = \sqrt{\frac{\lambda^2 D}{\nu^3}}$. Esse é um processo bastante usual, e o motivo disso é simples. É possível fazer transformações nas variáveis h , \vec{x} e t de modo a tornar a equação KPZ (2.16) dependente de apenas um único parâmetro o qual é dado essencialmente pela constante de acoplamento g [18, 23, 35, 37]. Para ilustrar, façamos as transformações: $h = h' \sqrt{\frac{2D}{\nu}}$ e $t = \frac{t'}{\nu}$ [37]. Neste caso, usando a regra da cadeia temos:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial h}{\partial h'} \frac{\partial h'}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial t} = \sqrt{2D\nu} \frac{\partial h'}{\partial t'}, \quad (4.1)$$

Para as derivadas espaciais faremos o desenvolvimento apenas para a coordenada x , pois a generalização é direta.

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial h}{\partial h'} \frac{\partial h'}{\partial x} = \sqrt{\frac{2D}{\nu}} \frac{\partial h'}{\partial x}, \quad (4.2)$$

De (4.2) segue imediatamente:

$$\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 = \frac{2D}{\nu} \left(\frac{\partial h'}{\partial x}\right)^2 \quad (4.3)$$

e

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = \sqrt{\frac{2D}{\nu}} \frac{\partial^2 h'}{\partial x^2} \quad (4.4)$$

Usando a propriedade da função delta de Dirac $\delta(ay) = \frac{1}{|a|}\delta(y)$ o ruído passará a satisfazer:

$$\langle \eta(\vec{x}, t') \eta(\vec{x}^1, t'^1) \rangle = 2D\nu \delta^d(\vec{x} - \vec{x}^1) \delta(t' - t'^1) \quad (4.5)$$

Substituindo os resultados (4.1), (4.3), (4.4) e (4.5) em (2.16):

$$\sqrt{2D\nu} \frac{\partial h'}{\partial t'} = \sqrt{\frac{2D}{\nu}} \nu \nabla^2 h' + \frac{2D}{\nu} \frac{\lambda}{2} |\nabla h|^2 + \eta(\vec{x}, t'), \quad (4.6)$$

e após a divisão pelo fator $\sqrt{2D\nu}$:

$$\frac{\partial h'}{\partial t'} = \nabla^2 h' + \sqrt{\frac{\lambda^2 D}{2\nu^3}} |\nabla h|^2 + \varsigma(\vec{x}, t'). \quad (4.7)$$

O novo ruído obedece a

$$\langle \varsigma(\vec{x}, t') \varsigma(\vec{x}^1, t'^1) \rangle = \delta^d(\vec{x} - \vec{x}^1) \delta(t' - t'^1) \quad (4.8)$$

Agora o ruído $\varsigma(\vec{x}, t')$ tem variância unitária. Note que a constante que está na frente do termo não linear é essencialmente a constante de acoplamento g , exceto pelo fator $\frac{1}{\sqrt{2}}$. Vemos então que a constante de acoplamento determina o grau de não-linearidade do processo.

4.3 Estudo numérico em 1 dimensão

A forma discretizada (3.9) é capaz de dar bons resultados para os expoentes de escala desde que a não-linearidade da equação KPZ não seja muito alta, e se os tempos de simulação não forem muito elevados. Porém, para g suficientemente grande, as instabilidades que discutimos no capítulo 3 aparecem. Nós também pudemos observar este fenômeno, como ilustrado na figura 3.1. Para a interface representada na figura os parâmetros utilizados na equação foram: $\nu = 1$, $D = 1$ e $g = 48$. Os passos espacial e temporal foram, respectivamente, $\Delta x = 1$ e $\Delta t = 0.05$ e o tamanho do sistema foi $L = 500$. Na figura observamos em (a) o surgimento de um pico no instante $t = 55.5$, que cresce muito rapidamente como vê-se em (b), no instante $t = 55.8$. Para controlar este problema, utilizamos o método proposto por Dasgupta et al [18]. Após o uso da função de correção proposta no método, observamos que as instabilidades foram canceladas após se fazer $c = 1.0$ e serem refeitas as integrações com os mesmos parâmetros.

Também avaliamos o problema da inconsistência entre os parâmetros usados na equação discretizada e os da versão contínua. No capítulo 3, apresentamos os resultados obtidos por Lam e Shin [16] para a amplitude de escala $A(\equiv \frac{D}{\nu})$, que está relacionada à largura de interface w no estado estacionário, através da equação (3.14). Para avaliar as inconsistências, simulamos a versão discretizada (3.9) e sua versão corrigida pela função $f(x)$. Restringimos nossas simulações a valores de g e L suficientemente pequenos com o intuito de evitar a ocorrência de instabilidades. Fizemos $\nu = D = 1$ e $g = 2$, e os tamanhos da rede foram $L = 8, 16, 32$ e 64 . Ao valor de A

estimado pelas equações discretizadas chamaremos A' , e ele será dado por:

$$A' \equiv \frac{12 \langle w_{2sat} \rangle}{L}. \quad (4.9)$$

Note que a equação (4.9) foi obtida elevando-se a expressão (3.14) ao quadrado, e usando o fato que $\alpha = 1/2$ em $d = 1$, e usamos a média da rugosidade ao quadrado no estado estacionário denotada por $\langle w_{2sat} \rangle$ para calcular nossas estimativas de w_{2sat} . Espera-se que $A' \rightarrow A = 1$ à medida que $L \rightarrow \infty$. O comportamento assintótico de A' é visto mais claramente num gráfico de A' versus $1/L$, como na figura 4.1, onde apresentamos as estimativas provenientes da equação discretizada (3.9) e da versão com a função de correção. A primeira dá uma estimativa perto de 0.85, consistente com a que já havia sido relatada por outros autores [16]. Já com a versão "corrigida", pode-se observar a convergência para o valor correto $A' = 1$.

Vemos que a correção proposta inicialmente para controlar instabilidades também dá o valor correto da amplitude de escala A . Este é um resultado que até então era desconhecido, porque na maioria dos trabalhos anteriores nesta área estes assuntos eram tratados separadamente. Nossos resultados são um avanço significativo por resolver os dois problemas de uma só vez. Aparentemente, a única exceção é o trabalho de Gallego et al [14] que aborda estes dois problemas através de métodos "pseudo-espectrais", que resolvem a equação KPZ no espaço dos momentos. Para controlar as instabilidades, os métodos pseudo-espectrais necessitam de valores de Δt pequenos. Para que estas tenham probabilidade praticamente nula de ocorrência, Δt deve ser da ordem de 10^{-3} ou menor. Porém, a diminuição do incremento temporal para

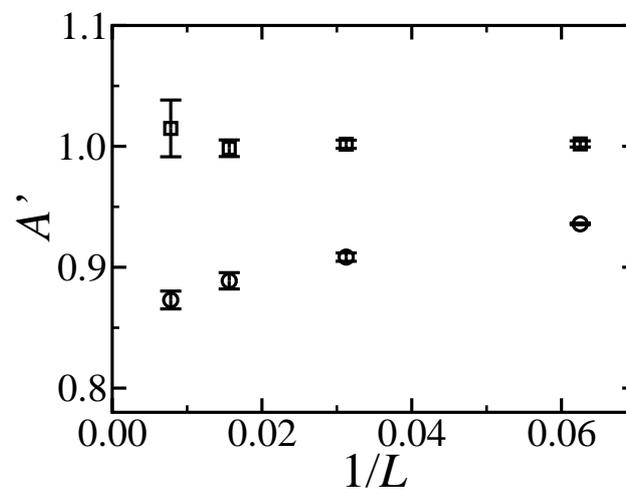


Figura 4.1: Amplitude da rugosidade ao quadrado como função do inverso do tamanho dos depósitos obtida através da integração da equação KPZ em $d = 1$ usando as equações (3.9) (\circ) e a equação (3.9) com a função de correção $f(|\nabla h|^2)$ substituindo $|\nabla h|^2$ (\square), utilizando $c = 1.0$.

controlar as instabilidades torna a simulação muito demorada. Nesse ponto, acreditamos que o método de discretização usado por nós com a função de correção é mais vantajoso pois pudemos controlar as instabilidades e fazer as simulações com valores de Δt de ordens maiores ou iguais a 10^{-2} (mesmo para o caso bidimensional que apresentaremos em seguida). Além disso, o método por nós usado efetivamente suprime as instabilidades, em vez de se basear em uma baixíssima probabilidade de a instabilidade ocorrer.

Como nesta seção mostramos que a forma discretizada (3.9) “corrigida” com a função de correção permite simulações estáveis e consistentes para o problema de crescimento, daqui por diante para o caso bidimensional esta será a discretização adotada.

4.4 Estudo numérico em 2 dimensões

4.4.1 Conjuntos utilizados

O objetivo maior deste trabalho é a verificação da universalidade das distribuições de alturas e rugosidade ao quadrado, no estado estacionário, para a classe KPZ. Para tanto, avaliamos quatro conjuntos de parâmetros distintos aumentando sistematicamente o valor da não-linearidade g . No capítulo 3 apontamos que as instabilidades ocorrem com mais facilidade para valores de g mais altos. Isto acarreta a escolha de valores do parâmetro da função de correção c mais elevados. Os valores de g , e os de c correspondentes, juntamente com a denominação de cada conjunto que usamos são dados na tabela 4.1. Os passos espaciais usados foram $\Delta x = \Delta y = 1$, e o temporal foi

$\Delta t = 0.04$. Mantivemos $\nu = 0.5$ e $D = 0.005$.

Conjunto	g	c
A	12	0.1
B	24	0.5
C	48	1.0
D	96	4.0

Tabela 4.1: Parâmetros não-lineares usados na integração da equação KPZ em $d = 2$, e as correspondentes constantes para controle das instabilidades. Em todos os casos, $\nu = 0.5$ e $D = 0.005$.

4.4.2 Expoentes de rugosidade

Antes de entrarmos no estudo das distribuições de alturas e rugosidades, apresentamos as nossas estimativas para o expoente de rugosidade α . Podemos comparar nossas estimativas com a de outros autores, como [17, 23, 35, 36, 37, 46]. O cálculo dos expoentes também é útil pois pode ser usado como mais um teste para a discretização que estamos utilizando, visto que valores muito discrepantes podem ser indicativos de erros. Em $d = 1$, Dasgupta et al usaram a mesma discretização que usamos aqui e encontraram $\beta \approx 0.32$, em muito bom acordo com o valor exato $\beta = 1/3$ [18].

Para os conjuntos A, B, C e D calculamos expoentes efetivos $\alpha(L)$, para tamanhos de rede dados por 2^n , com n variando de 3(L=8) a 6(L=128). De modo a garantir estimativas mais precisas, é necessário fazer médias num

número razoável de configurações, ou seja, é preciso tomar um número de realizações suficientemente grande de modo a reduzir as flutuações na região de saturação. Aqui fazemos médias sobre $N = 2 \cdot 10^3$ configurações para $8 \leq L \leq 64$, e $N = 10^3$ para $L = 128$.

Os expoentes efetivos $\alpha(L)$ são definidos pela expressão:

$$\alpha(L) = \frac{1}{2 \ln(2)} \ln \left[\frac{\langle w_{2sat}(L) \rangle}{\langle w_{2sat}(L/2) \rangle} \right] \quad (4.10)$$

O adjetivo "efetivo" é aqui empregado porque os expoentes obtidos de (4.10), em geral, apresentam efeitos de tamanho finito do sistema. Espera-se que estes valores efetivos convirjam para o valor real (assintótico) do expoente à medida que $L \rightarrow \infty$. Essa metodologia pode ser encontrada em outros trabalhos com modelos discretos [33, 34, 45], onde os efeitos de tamanho finito podem ser muito fortes.

Na figura 4.2 mostramos $\alpha(L)$ versus $1/L$ para os conjuntos de parâmetros A, B, C e D.

Como a simulação para tamanhos de redes maiores exigia um tempo consideravelmente grande, as estimativas por nós obtidas não são tão precisas quanto aquelas provenientes de modelos discretos [33, 34]. No entanto, o comportamento de nossas estimativas é consistente com as estimativas mais precisas para α que são em torno de $\alpha \approx 0.39$.

É interessante observar que as estimativas de $\alpha(L)$ evoluem de formas distintas dependendo do valor da não-linearidade. Para o conjunto A, que tem o menor g , as estimativas são as que tem uma maior dependência com o tamanho da rede. Deve-se notar que para a equação EW, em $d = 2$, o

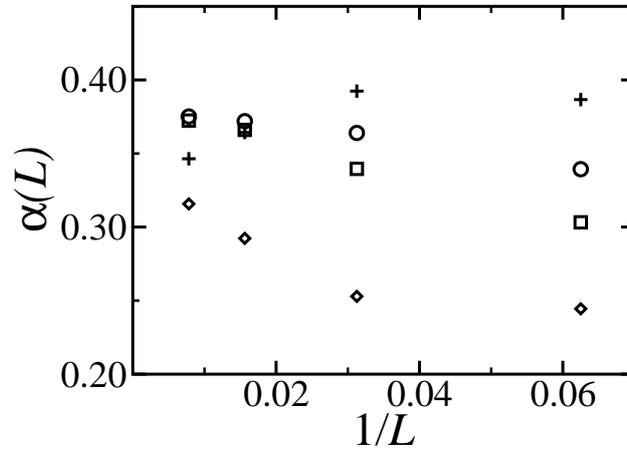


Figura 4.2: Expoentes efetivos α versus o inverso do tamanho da rede para interfaces KPZ em $d = 2$. Os símbolos correspondem aos conjuntos A (\diamond), B (\square), C (\circ) e D ($+$). Para $L \leq 64$ as barras de erro são menores que o tamanho dos símbolos. Para $L = 128$ a incerteza em $\alpha(L)$ é cerca de 0.01.

valor de $\alpha = 0$, por isso, como o conjunto A é o que tem o menor valor de g , os pequenos valores de α observados no gráfico para os menores tamanhos de rede para este conjunto indicam uma transição do regime EW para o KPZ. Para valores intermediários de g , conjuntos B e C, o comportamento é bastante semelhante e a dependência no tamanho do sistema é reduzida. Extrapolações para $L \rightarrow \infty$ ($1/L \rightarrow 0$), com base nestes dois conjuntos, fornecem $\alpha = 0.38$. Para o conjunto D, onde a não-linearidade é mais forte, as estimativas são consistentes até o tamanho $L = 64$, mas quando $L = 128$ diverge dos valores usuais, provavelmente indicando que deve haver um *crossover* mais complexo para o valor assintótico de α .

Nossas estimativas são próximas a outras também oriundas da resolução numérica da equação KPZ [17, 23, 37] (na última referência foram calculadas

estimativas para o expoente β , mas através das relações $\alpha + z = 2$ e $z = \frac{\alpha}{\beta}$ os valores de α encontrados estão de acordo com os nossos). Uma solução numérica da equação KPZ mais recente [46], porém, sugere que $z = 2$, e ainda a não validade da relação exata $\alpha + z = 2$. Nós acreditamos que esta discrepância é devido ao uso de não-linearidades muito baixas pelos autores, o que leva a um longo regime EW, e neste caso a transição para escala KPZ só poderá ser detectada para sistemas com tamanhos de rede muito grandes e tempos muito longos.

4.4.3 Universalidade das distribuições de alturas

Agora, direcionamos nossa atenção à análise da universalidade das distribuições de alturas, através do coeficiente de assimetria (2.2) e da curtose (2.3). Antes de discutirmos nossos resultados, porém, chamaremos a atenção para um ponto importante que o leitor mais atento deve ter percebido. Quando falamos em caracterizar as distribuições de alturas, calculamos apenas os primeiros momentos da distribuição ao invés de tentarmos obter a distribuição inteira como no caso da rugosidade ao quadrado. A razão para não se tentar obter a distribuição inteira de alturas está no fato de estas sofrerem fortemente a influência do tamanho finito do sistema, dificultando bastante o colapso das curvas de distribuição de alturas para diferentes parâmetros da equação, ou modelos discretos distintos. Assim, para observar a universalidade de tais distribuições diretamente a partir das curvas das distribuições de alturas se faz necessária a obtenção destas para tamanhos de sistemas bastante grandes de modo a eliminar os efeitos de tamanho finito.

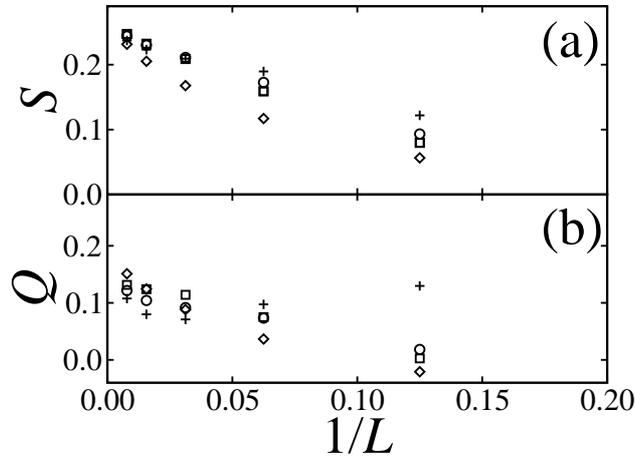


Figura 4.3: (a) Coeficiente de assimetria e (b) curtose das distribuições de alturas de interfaces KPZ em $d = 2$ versus inverso do tamanho da rede. Cada símbolo corresponde ao mesmo conjunto da figura 4.2.

Isto já não ocorre com as distribuições de rugosidades como veremos mais a frente. O uso da curtose e do coeficiente de assimetria é mais adequado aqui pois essas grandezas sevem para caracterizar as distribuições de alturas e ademais são menos sensíveis aos efeitos de tamanho finito, por isto são preferidas no estudo da universalidade de tais distribuições.

As figuras 4.3(a) e 4.3(b) mostram o coeficiente de assimetria (S) e a curtose (Q), respectivamente, como função de $1/L$ para os nossos conjuntos de dados. As figuras mostram as estimativas sem barras de erro por motivos de clareza na observação dos dados nos gráficos. As barras de erro podem ser observadas nas figuras 4.4(a) e 4.4(b).

As estimativas de S são precisas e consistentes com uma assimetria da distribuição, S positivo significando que as interfaces são constituídas de picos pontiagudos e vales largos. Lembrando que $S = 0$ para crescimento

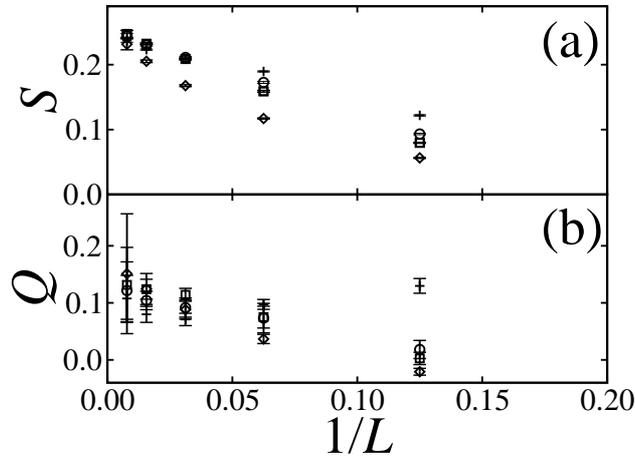


Figura 4.4: Mesmo que a figura 4.3, mas agora incluindo as barras de erro.

EW. Valores pequenos de S são indicadores de uma transição do regime EW para o KPZ. Esta observação é consistente com os resultados da figura 4.3(a) para os tamanhos $L = 8$ e $L = 16$, que mostram aumento de S com o aumento da não-linearidade. Note que $S \approx 0.05$ para o menor valor de g (conjunto A) em $L = 8$.

A universalidade de S , no limite hidrodinâmico, é sugerida pela extrapolação dos resultados para todos os conjuntos quando fazemos $1/L \rightarrow 0$. Fazendo uma extrapolação por mínimos quadrados para os conjuntos B e C obtemos a estimativa $|S| = 0.25 \pm 0.01$. Essa estimativa é um pouco abaixo daquela encontrada com modelos discretos $S = 0.26 \pm 0.01$ [34, 33]. Lembremos aqui que a escolha de um λ negativo resultaria num valor de S também negativo, como discutido em [34]. Isso se deve ao fato de uma transformação $h \rightarrow -h$ deixar a equação (2.16) invariante se também for feita uma mudança $\lambda \rightarrow -\lambda$. No entanto, esta transformação altera o sinal do coeficiente de assimetria, sem alterar porém o valor universal $|S|$.

Como o cálculo da curtose requer momentos de ordens superiores aos usados para o cálculo do coeficiente de assimetria, as estimativas dessa quantidade perdem em precisão. Aliás, este é o principal motivo para a não utilização de momentos de ordens superiores “amostrais” para a caracterização de uma distribuição desconhecida. O maior causador destes erros, além da limitação do tamanho da amostra, está na aproximação feita no cálculo dos momentos. Os valores “reais” da distribuição são dados por integrais que aqui aproximamos por somas. Para momentos de ordens maiores estas aproximações se tornam piores. Um trabalho antigo em estatística já apontava que no cálculo de momentos amostrais de 7ª ou 8ª ordem os valores obtidos podem facilmente serem dados pelo dobro ou a metade do valor real destes momentos para a distribuição de interesse [47]. Maiores discussões deste assunto podem ser encontradas em [48].

Retornando à análise de nossos dados, observa-se na figura 4.4(b) que o erro em Q , para $L = 64$, está em torno de 0.02 e cresce para 0.05 quando $L = 128$. Esse crescimento é esperado pois o número de amostras do primeiro caso é o dobro do segundo. Extrapolando por mínimos quadrados os dados para os conjuntos B e C, encontramos a estimativa $Q = 0.15 \pm 0.1$, que é próxima da estimativa $Q = 0.134 \pm 0.015$ obtida com modelos discretos [33, 34].

4.5 Universalidade das distribuições de rugosidade ao quadrado

A análise das distribuições de rugosidade ao quadrado foi inicialmente sugerida por Foltin et al [39] e Plischke et al [49] porque o conhecimento desta grandeza é mais informativo que o simples conhecimento do valor médio $\langle w_2 \rangle$, e além disso seria útil para identificar classes de universalidade por poder ser medida graças aos avanços das técnicas de AFM e STM [40].

Trabalhando em $d = 1$, Foltin et al notaram que o comportamento de escala $w \equiv L^{1/2}$ é uma característica típica do passeio aleatório (random walk), e propuseram que esta semelhança deveria ir além da relação acima. Os autores desenvolveram uma expressão analítica para a função densidade de probabilidades da rugosidade ao quadrado (que nos referiremos simplesmente por distribuição de rugosidade, daqui em diante), $P_L(w_2)$, para interfaces do tipo “passeio aleatório“, isto é, que sigam a relação $w \equiv L^{1/2}$, e puderam mostrar que $P_L(w_2)$ dependia apenas de um parâmetro de escala, podendo ser expressa simplesmente por:

$$P_L(w_2) = \frac{1}{w_2} \Phi \left(\frac{w_2}{\langle w_2 \rangle} \right), \quad (4.11)$$

onde Φ é uma função universal característica de um certo processo de crescimento. Em $d = 1$ uma expressão fechada para Φ foi obtida [39]. Essa expressão pôde ser comparada com resultados de simulações com modelos discretos nas classes KPZ e EW, e a validade da relação (4.11) foi comprovada [39, 49].

Posteriormente, Rácz e Plischke [40] estenderam a validade da relação (4.11) para $d = 2$, e verificaram a universalidade de Φ para outras dinâmicas além da EW e KPZ, analisando distribuições oriundas de simulações com modelos discretos de MBE, além de comparação direta com distribuições obtidas experimentalmente para filmes crescidos por MBE.

Aarão Reis [42], estudando distribuições de rugosidades de modelos discretos nas classes KPZ e VLDS (referida anteriormente como LD), adotou a forma alternativa dada pela relação de escala (4.11):

$$P_L(w_2) = \frac{1}{\sigma} \Psi \left(\frac{w_2 - \langle w_2 \rangle}{\sigma} \right), \quad (4.12)$$

onde $\sigma \equiv \sqrt{\langle w_2^2 \rangle - \langle w_2 \rangle^2}$, é o desvio padrão da rugosidade ao quadrado.

Segundo estudo recente [51], esta última forma é mais vantajosa que a relação (4.11) por ser menos sensível a efeitos de tamanho finito.

Na figura 4.5 estão nossas estimativas de P_L vindas de nossas integrações numéricas da equação KPZ, para os conjuntos A, B, C e D com $L = 128$, e usando a relação de escala (4.12). O bom colapso das curvas é mais uma confirmação da universalidade das distribuições de rugosidade apontada anteriormente pela simulação de modelos discretos na classe KPZ [42]. A figura 4.6 compara as curvas de densidade dos conjuntos C e D para $L = 128$, com a curva da distribuição de rugosidades do modelo RSOS para $L = 256$, encontrada em [42], e confirma nossa análise anterior.

Para avaliar quantitativamente o acordo entre as distribuições, calculamos sua curtose e seu coeficiente de assimetria. A tabela 4.2 dispõe os resultados encontrados. Calculando a média e o desvio padrão para S e Q na tabela 4.2

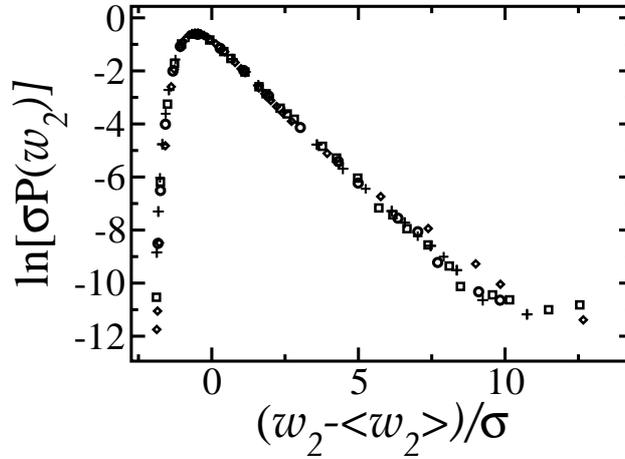


Figura 4.5: Distribuições de rugosidade escaladas pela relação (4.12) para interfaces KPZ em $d = 2$ para os conjuntos A, B, C e D. Os símbolos são os mesmos que na figura 4.2.

encontramos $S = 1.73 \pm 0.04$ e $Q = 5.6 \pm 1.1$. Mais uma vez os conjuntos A e D são os que mais se afastam dessas estimativas centrais, como observamos anteriormente para as demais grandezas. Porém, neste caso, estes desvios são tão pequenos que não podem ser detectados por uma inspeção visual das distribuições (vide, por exemplo, os dados para o conjunto D na figura 4.6). Para modelos discretos foram encontradas as estimativas $S = 1.70 \pm 0.02$ e $Q = 5.4 \pm 0.3$ [42], de acordo com as que apresentamos aqui.

Outro aspecto importante das distribuições de rugosidade é que elas têm correções de tamanho finito muito menores que outras quantidades como os expoentes de escala. Na fig. 4.7 mostramos para o conjunto B as curvas de distribuição de rugosidades para os tamanhos $L = 8, 16, 32, 64$ e 128 . Note que os resultados são muito semelhantes para todos os tamanhos, havendo apenas um leve desvio da cauda à esquerda da curva para o tamanho $L = 8$.

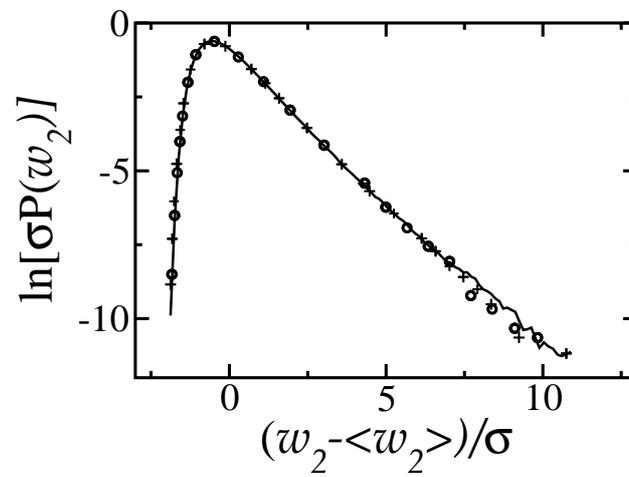


Figura 4.6: Distribuições de rugosidade escaladas pela relação (4.12) para interfaces KPZ em $d = 2$ para os conjuntos C e D ($L = 128$), e para o modelo RSOS ($L = 256$). A curva cheia corresponde ao modelo RSOS, e os demais símbolos são os mesmos da figura 4.2.

Conjunto	S	Q
A	1.948525	7.418228
B	1.695276	5.213373
C	1.656813	4.941506
D	1.623499	4.793048

Tabela 4.2: Coeficiente de assimetria e curtose da distribuição de rugosidade dos conjuntos A, B, C e D, para $L = 128$.

Essa característica foi explorada para evidenciar que modelos de deposição do tipo balística são realmente membros da classe KPZ, em $d = 2$ [50]. Essa era uma questão em discussão porque estimativas dos expoentes de escala para o modelo de deposição balística tem uma dependência muito forte com o tamanho do sistema [45]. E as estimativas obtidas, em geral, eram bastante inferiores à de outros modelos na classe KPZ. Além disso, num trabalho analítico derivou-se uma equação de crescimento para o modelo BDNNN (que é um modelo análogo ao de deposição balística apresentado no capítulo 2, com a exceção de esta variação permitir que uma partícula se agregue na diagonal), distinta da equação KPZ [52]. Por estes motivos, não havia, a priori, nenhuma razão para afirmar que modelos do tipo balístico realmente pertenciam à classe KPZ. A maior prova de que realmente estes modelos pertencem à classe KPZ em $d = 2$ foi dada em [50], onde foi mostrado que o DB e o BDNNN tem uma distribuição de rugosidades "igual" à do modelo RSOS. Quando mostramos que o modelo RSOS tem a mesma distribuição de rugosidade que a de nossos conjuntos, enfatizamos mais ainda que os

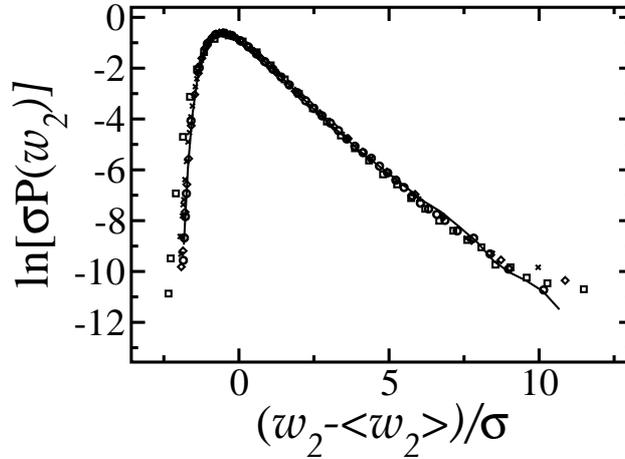


Figura 4.7: Distribuições de rugosidade escaladas pela relação (4.12) para interfaces KPZ em $d = 2$ para o conjunto B para os tamanhos de rede $L = 8(\square)$, $16(\times)$, $32(\diamond)$, $64(\circ)$ e $128(-)$.

modelos do tipo balístico pertencem à classe KPZ em $d = 2$.

4.5.1 Distribuição com cauda do tipo exponencial alongada

A última característica que analisamos a respeito das distribuições de rugosidade da classe KPZ é a aparente forma de exponencial alongada de sua cauda à direita, como pode ser observado: por exemplo, na figura 4.6, que mostra uma pequena curvatura para cima na cauda à direita.

Para possibilitar a análise das caudas de nossas curvas, assumiremos que $\Psi \equiv \sigma P_L(w_2)$ decai como $\Psi(x) \sim \exp(-Ax^\gamma)$, onde $x \equiv \frac{w_2 - \langle w_2 \rangle}{\sigma}$. Semelhantemente ao que fizemos com os expoentes de rugosidade, calcularemos expoentes efetivos $\gamma(x)$ definidos como:

$$\gamma(x) = \frac{\ln \left[\frac{\ln(\Psi(x))}{\ln(\Psi(x-\Delta))} \right]}{\ln [x/(x-\Delta)]}, \quad (4.13)$$

onde Δ é uma constante.

Nas figuras 4.8 e 4.9 mostramos $\gamma(x)$ versus $1/x^2$ para três conjuntos de parâmetros (B, C e D), para $L=64$ e $L=128$, respectivamente, usando $\Delta = 4$ na equação (4.13). A escolha do valor de $\Delta = 4$ foi adotada pois valores menores ($\Delta = 1, 2$) apresentavam muita flutuação, como pode ser visto na figura 4.10, onde repetimos o cálculo dos expoentes para $L = 64$, mas agora usando $\Delta = 1$.

Como o número de amostras para o tamanho $L = 64$ é consideravelmente maior que para $L = 128$, encontramos mais flutuação nas caudas da distribuição para este tamanho do que para o primeiro. Levando em consideração as estimativas de γ mais precisas do tamanho menor, pode-se notar que para $x \rightarrow \infty$ ($1/x^2 \rightarrow 0$), a tendência dos dados sugere que a cauda da distribuição de rugosidade é uma exponencial estendida com expoente γ entre 0.7 e 0.9, consistentes com os resultados para modelos discretos, que dão $\gamma \approx 0.8$ [42].

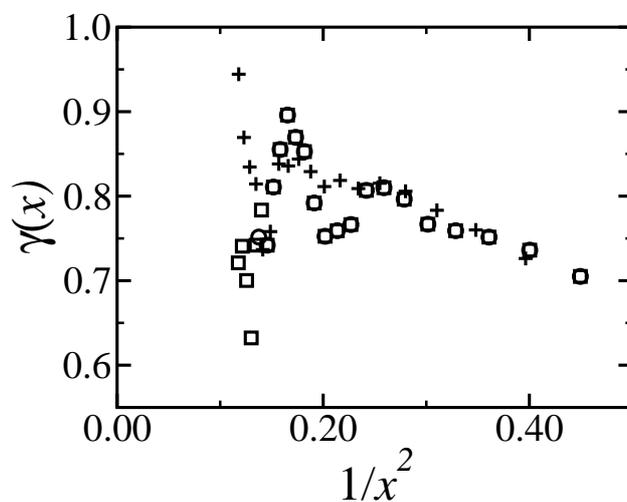


Figura 4.8: Exponentes efetivos $\gamma(x)$ vs $1/x^2$ das distribuições de rugosidade para interfaces KPZ em $d = 2$. Aqui usamos $\Delta = 4$ e o tamanho da rede é $L = 64$. Os símbolos são os mesmos da figura 4.2.

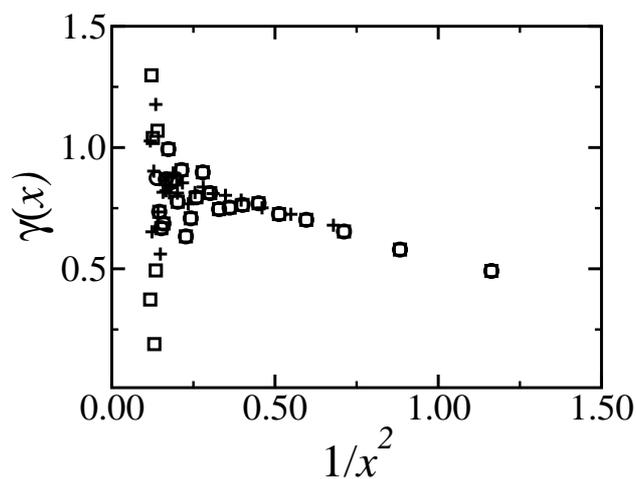


Figura 4.9: Mesmas grandezas da figura 4.8, para o tamanho de rede $L = 128$.

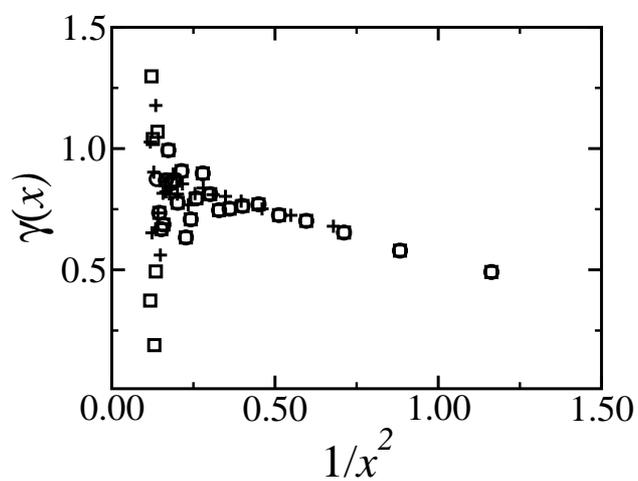


Figura 4.10: Mesmas grandezas da figura 4.8, para $\Delta = 1$, e usando os conjuntos A, B e D.

Capítulo 5

Conclusão

Resolvemos a equação KPZ numericamente em $d = 1$ e $d = 2$ usando métodos de diferenças finitas. O caso unidimensional confirma o aparecimento de instabilidades para não-linearidades altas e tamanhos de redes grandes. As instabilidades puderam ser suprimidas pela substituição do termo $|\nabla h|^2$ por uma função exponencialmente decrescente desta quantidade na equação KPZ e subsequente forma discretizada (3.9). Além disso, esta mudança implicou em estimativas consistentes da amplitude de escala A , em contraste com as estimativas da discretização original. Em $d = 2$, varremos os parâmetros da equação num intervalo razoável onde efeitos de crossover (isto é, transientes com crescimento EW ou crescimento aleatório) não são grandes. Confirmamos a universalidade dos expoentes de rugosidade, da distribuição de alturas e de rugosidade no estado estacionário, que foram previamente obtidas através de modelos discretos. Calculamos estimativas da curtose e do coeficiente de assimetria destas distribuições para mostrar quantitativamente que os resultados aqui encontrados concordam bastante bem

com outros resultados anteriores. Também mostramos que há evidências de que as caudas das distribuições de rugosidades são exponenciais alongadas, o que também está de acordo com resultados obtidos com modelos discretos, sugerindo assim que interfaces KPZ em $d = 2$, no estado estacionário, não são gaussianas.

Nossos resultados não são capazes de dar resultados tão precisos quanto aqueles dos modelos discretos, o que é esperado devido às operações de ponto flutuante. Num primeiro momento, isto pode parecer diminuir a importância deste trabalho. Entretanto, enfatizamos que a conexão entre modelos discretos e a equação KPZ não pode ser derivada de maneira matematicamente rigorosa, e como já dissemos, alguns modelos são controversos nesse ponto (por exemplo, DB [52]). Além disso, trabalhos com modelos discretos não são capazes de variar sistematicamente os parâmetros da equação KPZ; aliás, apenas dois ou três destes modelos fornecem estimativas onde os efeitos de tamanho finito não são muito relevantes a ponto de se poder afirmar claramente que há consistência com a universalidade (por exemplo, [34]). Assim, a confirmação de resultados no contexto da própria equação KPZ, utilizando diferentes parâmetros, é de grande importância. Até onde sabemos, esta é a primeira discussão quantitativa sobre as distribuições de alturas e rugosidade obtida diretamente a partir da integração numérica da equação KPZ em $d = 2$. Estas quantidades são muito úteis para a caracterização completa de uma classe de crescimento, particularmente devido aos efeitos de correções de escala na estimação de expoentes.

Acreditamos ainda que este trabalho pode motivar futuros trabalhos numéricos em dimensões superiores, onde o debate acerca da existência de

uma dimensão crítica superior finita (a dimensão onde a não-linearidade é sempre irrelevante) permanece [53, 54].

Referências Bibliográficas

- [1] A.L. Barabási e H.E. Stanley, *Fractal concepts in surface growth* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995).
- [2] C.-S. Chin e M. den Nijs, *Phys. Rev. E* **59**, 2633 (1999).
- [3] Y. Shim e D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 036110 (2001).
- [4] F. Family e T. Vicsek, *Journal Phys. A* **18**, L75-L81 (1985)
- [5] S. F. Edwards e D. R. Wilkinson, *Proc. R. Soc. London* **381**, 17 (1982).
- [6] M. Kardar, G. Parisi and Y.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
- [7] M. J. Void, *J. Colloid. Sci.* **14**, 168 (1959); *J. Phys. Chem.* **63**, 1608 (1959)
- [8] M. Eden, em *Proceedings of the fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, editado por F. Neyman (Universidade da Califórnia, Berkeley, 1961), Vol. IV.
- [9] J. Krug, *Adv. Phys.* **46**, 139 (1997).
- [10] D. Foster, D. R. Nelson e M. J. Stephan, *Phys. Rev. A* **16**, 732 (1977).

- [11] J. M. Burgers, *The Nonlinear Diffusion equation* (Riedel, Boston, 1974)
- [12] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods* (Springer-Verlag, Berlin, 1985)
- [13] J. M. Kim and J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 2289.
- [14] R. Gallego, M. Castro and J. M. López, Phys. Rev. E **76**, 051121 (2007).
- [15] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*, Vol. 1, (John Wiley and Sons, inc, New York, 1967, Terceira edição).
- [16] C.-H. Lam and F. G. Shin, Phys. Rev. E **57**, 6506 (1998).
- [17] K. Moser, J. Kertész and D. E. Wolf, Physica A **178**, 215 (1991).
- [18] C. Dasgupta, J. M. Kim, M. Dutta, and S. Das Sarma, Phys. Rev. E **55**, 2235 (1997).
- [19] Z. W. Lai e S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **66**, 2348 (1991).
- [20] J. Villain, J. Physique I (França) **1**, 19 (1991).
- [21] D. E. Wolf, e J. Villain, Europhy. Lett. **13**, 389 (1990).
- [22] J. Krug, P. Meakin, e T. Halpin-Healy. Phys. Rev. A **45**, 638 (1992).
- [23] M. Beccaria e G. Gurci, Phys. Rev. E **50**, 4560 (1994).
- [24] T. J. Newman e A. J. Bray. J. Phys. A **29**, 7917 (1996).
- [25] C.-H. Lam and L. M. Sander, Phys. Rev. Lett. **71**, 561 (1993).

- [26] A. Giacometti and M. Rossi, Phys. Rev. E **63**, 046102 (2001).
- [27] A. Giacometti and M. Rossi, Phys. Rev. E **62**, 1716 (2000).
- [28] J. G. Amar e F. Family, Phys. Rev E **47**, 1595 (1993).
- [29] V. G. Miranda e F. D. A. Aarão Reis, Phys. Rev. E, **77**, 031134 (2008).
- [30] C.-H. Lam and F. G. Shin, Phys. Rev. E **58**, 5592 (1998).
- [31] T. Ala-Nisila, T. Hjelt et al, J. Stat. Phys. **72**, 207 (2003).
- [32] P. Devillard e H. E. Stanley, Physica A **160**, 298 (1989).
- [33] E. Marinari, A. Pagnani and G. Parisi, J. Phys. A **33** (2000) 8181.
- [34] F. D. A. Aarão Reis, Phys. Rev. E **69**, 021610 (2004).
- [35] A. Chakrabarti and R. Toral, Phys. Rev. B **40**, 11419 (1989).
- [36] H. Guo, B. Grossmann and M. Grant, Phys. Rev. Lett. **64**, 1262 (1990).
- [37] J. G. Amar and F. Family, Phys. Rev. A **41**, 3399 (1990).
- [38] M. Lässig, Phys. Rev. Lett. **80**, 2366 (1998).
- [39] G. Foltin, K. Oerding, Z. Rácz, R. L. Workman, and R. K. P. Zia, Phys. Rev. E **50**, R639 (1994).
- [40] Z. Rácz e M. Plischke, Phys. Rev. E **50**, 3530 (1994).
- [41] T. Antal, M. Droz, G. Györgyi, e Z. Rácz, Phys. Rev. E **65**, 046140 (2002).

- [42] F. D. A. Aarão Reis, Phys. Rev. E **72**, 032601 (2005).
- [43] E. Marinari, A. Pagnani, G. Parisi, e Z. Rácz, Phys. Rev. E **65**, 026136 (2002).
- [44] J. A. R. Euzébio, Dissertação de Mestrado apresentada ao departamento de física da UFF em Agosto de 2005.
- [45] F. D. A. Aarão Reis, Phys. Rev. E **63**, 056116 (2001).
- [46] K. Ma, J. Jiang, and C. B. Yang, Physica A **378**, 194 (2007).
- [47] K. Pearson, *Skew Correlation and non-linear Regression*, Drapers' Company Research memoir, 1905, p. 9.
- [48] W. P. Elderton, *Frequency curves and correlation*, Charles & Edwin Layton, segunda edição, London, (1927).
- [49] M. Plischke, Z. Rácz e R. K. P. Zia, Phys Rev. E **50**, 3589 (1994)
- [50] F. D. A. Aarão Reis, Physica A **364**, 190 (2006).
- [51] T. J. Oliveira and F. D. A. Aarão Reis, Phys. Rev. E **76**, 061601 (2007).
- [52] E. Katzav and M. Schwartz, Phys. Rev. E **70**, 061608 (2004).
- [53] H. C. Fogedby, Phys. Rev. Lett. **94**, 195702 (2005).
- [54] L. Canet and M. A. Moore, Phys. Rev. Lett. **98**, 200602 (2007).