

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

INSTITUTO DE FÍSICA

Simulação de modelos na classe

KPZ em 3 e 4 dimensões

Jônatas Araujo Ribeiro Euzébio

jonatas@if.uff.br

Orientador: Fábio David Alves Aarão Reis

reis@if.uff.br

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

Niterói, agosto de 2005.

Agradecimentos

Aos meus pais, Suely e Jerônimo, e à minha irmã, Carolina, cuja presença e apoio foram fundamentais para a realização desta dissertação.

Ao Fábio, pela orientação e incentivo a cada fase deste trabalho.

À todas as outras pessoas - amigos, colegas e professores - que, de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho.

Ao CNPq e à FAPERJ, pelo suporte financeiro.

Resumo

Estudamos duas questões ainda não esclarecidas a respeito da equação de crescimento de interfaces de Kardar, Parisi e Zhang (KPZ): a existência ou não de uma dimensão crítica superior e a universalidade das distribuições de alturas no estado estacionário.

Há controvérsias entre trabalhos anteriores com relação à existência de um valor finito para a dimensão crítica superior (d_c) para a equação KPZ. Enquanto alguns apontam o valor $d_c = 4$, outros indicam $d_c = \infty$. Por meio de simulações de modelos de crescimento discretos KPZ (*etching* e RSOS) mostramos que, se existir, $d_c > 4$. Como veremos posteriormente, para que d_c fosse igual a 4, deveríamos obter os expoentes de escala $\alpha = 0$ e $z = 2$ nesta dimensão, sendo observada uma relação de escala logarítmica entre a rugosidade no regime de saturação e o tamanho linear do substrato. Porém, nossos dados, além de excluirmos tal relação logarítmica, nos levam a $0.185 < \alpha < 0.25$ e $z < 2$ para os expoentes de rugosidade e dinâmico, respectivamente, descartando $d_c = 4$. Em dimensão $d = 3$, nossas estimativas sugerem $\alpha \approx 0.3$ e $z \approx 1.7$.

Além disso, apontamos no sentido da universalidade das distribuições de alturas para diferentes modelos KPZ, calculando o coeficiente de assimetria S e a curtose Q para os modelos mencionados em dimensões $d = 3$ e $d = 4$. Em $d = 3$ temos $|S| = 0.39 \pm 0.02$ e $0.25 \leq Q \leq 0.3$, enquanto em $d = 4$ temos $|S| = 0.45 \pm 0.03$ e $Q \approx 0.4$.

Abstract

We studied two questions that are still unclear concerning the interfaces growth equation of Kardar, Parisi and Zhang (KPZ): the existence or not of a superior critical dimension, and the universality of the height distributions at the steady state.

There are controversies among previous works related to the existence of a finite value for the superior critical dimension (d_c) for the KPZ equation. While some of them point to the value $d_c = 4$, others indicate $d_c = \infty$. By simulations of KPZ discret growth models (etching and RSOS) we show that, if it exists, $d_c > 4$. As we will see later, if we assumed that d_c is equal to 4, we should obtain the scaling exponents $\alpha = 0$ and $z = 2$ in that dimension, and a logarithmic scaling relation between the interface width at the saturation regime and the linear size of the substrate should be observed. However, besides excluding this logarithmic relation, our data lead us to $0.185 < \alpha < 0.25$ and $z < 2$ for the roughness and the dynamic exponents respectively, discarding $d_c = 4$. In dimension $d = 3$, our estimates suggest $\alpha \approx 0.3$ and $z \approx 1.7$.

Moreover, we point in favor of the universality of height distributions of different KPZ discret growth models, by calculating the skewness S and the kurtosis Q for the mentioned models in dimensions $d = 3$ and $d = 4$. In $d = 3$, we have $|S| = 0.39 \pm 0.02$ and $0.25 \leq Q \leq 0.3$, while in $d = 4$ we have $|S| = 0.45 \pm 0.03$ and $Q \approx 0.4$.

Sumário

1	Introdução	1
2	O Estudo de Interfaces	4
2.1	Introdução	4
2.2	Métodos de Estudo	5
2.3	Conceitos de Escala	7
3	Modelos de Crescimento e Classes de Universalidade	14
3.1	Introdução	14
3.2	Deposição Aleatória	15
3.3	Deposição Aleatória com Relaxação Superficial - Modelo de Family	18
3.4	O Papel das Simetrias na Obtenção de Modelos Contínuos	19
3.5	Equação de Edwards e Wilkinson (EW)	20
3.6	Processos com Crescimento Lateral - Deposição Balística	23
3.7	Equação de Kardar, Parisi e Zhang (KPZ)	24
3.8	Outros Modelos Discretos na Classe KPZ	27
4	Modelos KPZ em Dimensões Superiores a $d = 1$	31
4.1	Introdução	31
4.2	Modelos KPZ em $d = 2$ - Resultados Anteriores	31
4.3	Dimensão Crítica Superior para a Equação KPZ	33
4.4	Modelos KPZ em $d = 3$ - Resultados Obtidos	34
4.5	Modelos KPZ em $d = 4$ - Resultados Obtidos	43
5	Conclusões	53

Capítulo 1

Introdução

A maioria das propriedades de materiais reais depende de forma crucial da presença de imperfeições - vacâncias em cadeias atômicas, deslocamentos de átomos, rugosidade de superfícies e interfaces - remanescentes das condições de não-equilíbrio sob as quais o material foi formado. A ciência do crescimento de cristais tem evoluído para que cada vez mais nos aproximemos do sólido cristalino perfeito, ideal, como evidenciado por técnicas experimentais como a de epitaxia por feixe molecular (MBE), que permite o desenvolvimento de dispositivos com precisão ao nível de planos atômicos individuais. Entretanto, o sucesso desta e de outras técnicas depende muito da habilidade de controlar os efeitos de desordem das condições de não-equilíbrio e estabelecer, ainda que empiricamente, a relação entre as condições de crescimento e a estrutura resultante.

Paralelamente à sua importância tecnológica, o crescimento de sólidos é de interesse básico, podendo nos fornecer pistas importantes sobre a formação de estruturas complexas na natureza através de processos microscópicos simples operando num ambiente desordenado.

Do ponto de vista teórico, que será o enfoque deste trabalho, processos de crescimento podem ser descritos por equações diferenciais estocásticas, que procuram descrever a evolução temporal de superfícies. Nesta dissertação, estaremos particularmente interessados na equação de Kardar, Parisi e Zhang (KPZ) [30]. Tais equações de crescimento permitem a classificação de superfícies de acordo com os principais mecanismos que determinam sua formação.

No próximo capítulo, após breve explanação sobre os métodos de estudo de interfaces, apresentaremos os conceitos de escala fundamentais para o entendimento deste trabalho. Em particular, indicaremos o grupo de superfícies para o qual nossa análise se aplica, e definiremos os expoentes de escala α , β e z , que terão papel determinante na classificação mencionada no parágrafo anterior. Em outras palavras, tais expoentes determinarão a classe de universalidade de um dado modelo teórico.

Embora algumas equações de crescimento permitam a obtenção dos expoentes de escala de maneira exata, para muitas outras (como a equação KPZ em $d > 1$) é necessário que se utilizem aproximações, como simulações computacionais de modelos discretos de crescimento. Os modelos discretos (atomísticos), diferentemente das equações de crescimento, descrevem o comportamento da interface em nível microscópico, incluindo os ingredientes fundamentais, que determinam as propriedades de escala da interface, e alguns detalhes característicos de um processo de crescimento específico. Muitas vezes é possível derivar, a partir de um dado modelo discreto, sua equação contínua correspondente.

No capítulo 3 discutiremos como se dá a obtenção de classes de universalidade com base em expoentes de escala. A análise de diferentes modelos teóricos (discretos e contínuos) culminará com a apresentação da classe de universalidade KPZ, que é uma das teorias contínuas de crescimento de interfaces mais estudadas. Algumas questões a respeito desta teoria permanecem em aberto, duas das quais serão tratadas aqui.

Uma delas é a existência ou não de uma dimensão crítica superior d_c para a equação KPZ, a partir da qual o termo responsável pela não-linearidade desta equação se tornaria irrelevante, acarretando uma equivalência entre a classe KPZ e a classe EW (que também será apresentada no capítulo 3). Enquanto alguns trabalhos anteriores apontam $d_c = 4$, outros levam a $d_c = \infty$. Se $d_c = 4$, seria observado um comportamento logarítmico da rugosidade ou largura de interface (grandeza que mede diretamente as flutuações na altura de superfícies) no regime de saturação com o tamanho linear do substrato nesta dimensão. Isso implicaria valores nulos para os expoentes de escala α e β , e $z = 2$. Por meio da simulação de dois modelos discretos de crescimento (*etching* e RSOS) na classe KPZ em $d = 4$, analisaremos a relação de escala da rugosidade na

saturação com o tamanho linear da rede e obteremos os expoentes de escala correspondentes a tais modelos, o que nos permitirá corroborar ou descartar tal dimensão como sendo a dimensão crítica superior para a equação KPZ.

Além disso, avaliamos se as distribuições de alturas dos modelos discretos KPZ mencionados são universais para diferentes dimensões. Isso pode ser feito por meio do cálculo do coeficiente de assimetria (S) e da curtose (Q), quantidades relacionadas ao terceiro e quarto momentos das distribuições de alturas, respectivamente. Embora estas quantidades não sejam suficientes para caracterizar completamente as distribuições, a obtenção de um valor único para o coeficiente de assimetria e para a curtose em diferentes modelos KPZ representa forte indicação da universalidade das distribuições de alturas. S e Q podem ser úteis também para a comparação de outras distribuições com as da classe KPZ. Trabalhos anteriores em $d = 2$ apontam para a universalidade de S e Q . Como veremos posteriormente, nossas simulações em $d = 3$ e $d = 4$ também levam a valores universais para o coeficiente de assimetria e para a curtose nestas dimensões.

Finalmente, nossas conclusões, considerações finais e perspectivas de continuação deste trabalho serão apresentadas no capítulo 5.

Capítulo 2

O Estudo de Interfaces

2.1 Introdução

De modo geral, a morfologia de uma superfície irregular pode ser caracterizada pela distribuição de suas alturas locais, distribuição esta que pode variar ou não no tempo. No estudo de superfícies e interfaces, freqüentemente estamos interessados não apenas na morfologia de várias interfaces pré-formadas, mas também em sua evolução temporal. Algumas superfícies são formadas como resultado de um processo de deposição, outras devido à erosão. Algumas interfaces se propagam através de meios inhomogêneos. Estudos nesse sentido têm recebido considerável atenção nos últimos anos [3,19,35,58,59].

Na maioria das vezes a forma de uma dada superfície na natureza depende da escala de comprimento da observação. Por exemplo, as montanhas do Himalaia podem ser lisas, se vistas do espaço, ou rugosas, quando observadas da Terra. Um extenso conjunto de interfaces pertence à classe dos fractais auto-afins, que, embora tenham sua morfologia (definida por quantidades estatísticas) alterada ao se fazer a mesma mudança de escala em todas as direções, preservam tal morfologia ou identidade estatística quando se faz uma mudança de escala que é diferente para cada direção [20]. Apresentam portanto simetria por transformação de escala. Tal simetria, obedecida por objetos auto-afins, nos permitirá classificar e talvez entender melhor algumas propriedades das superfícies rugosas na natureza.

2.2 Métodos de Estudo

A morfologia de grande parte das interfaces que separam diferentes meios contém flutuações que dependem localmente de vários fatores. Foram desenvolvidos métodos para caracterizá-la quantitativamente. Partindo do simples conceito de rugosidade como raiz quadrática média da flutuação nas alturas, obtemos expoentes de escala que denotam a relação da rugosidade com o comprimento do sistema, com o tempo, ou ainda as mudanças em seu comportamento.

Um dos conceitos modernos usados no estudo de diversos processos de crescimento é o de escala (*scaling*). Este tem um poder de previsão surpreendente, pois simples manipulações nos permitem conectar quantidades e expoentes aparentemente independentes. Muitas quantidades mensuráveis obedecem a relações de escala simples. O estudo de tais relações de escala nos permite definir classes de universalidade. Esse conceito é produto da Mecânica Estatística moderna, e desempenha um papel importante no estudo de interfaces rugosas, tendo sido inicialmente desenvolvido no estudo de transições de fase e fenômenos críticos. Uma classe de universalidade reúne processos que possuem características fundamentais semelhantes, como simetrias e interações entre partículas vizinhas. Os expoentes do comportamento de escala da rugosidade indicam a universalidade do processo, pois dependem de características fundamentais e não de detalhes, como pequenas variações de alguns parâmetros físicos, geometria de rede, etc. Ou seja, a idéia de classe de universalidade traduz o fato de que poucos fatores essenciais determinam os expoentes que caracterizam um comportamento de escala, de modo que sistemas diferentes que à primeira vista não parecem ter nenhuma conexão se comportam de modo bastante parecido.

Em muitos ramos da Física, o experimento é a força motriz que leva a novos problemas para investigação teórica. No que tange a rugosidade de superfícies às vezes ocorre o contrário. Por exemplo, o processo de rugosidade era um empecilho experimental que se buscava minimizar. Apenas recentemente alguns experimentais se interessaram pelo assunto, e agora mostram que a vida real é muito mais rica em mecanismos levando à rugosidade do que antecipado teoricamente [5, 11]. Graças aos avanços das técnicas

de espalhamento de raios-x e de microscopia de tunelamento e de força atômica, o comportamento espacial e/ou temporal da rugosidade têm sido observado em várias situações. Através de microscopia de tunelamento (*scanning tunneling microscopy* – STM), comportamentos auto-afins de rugosidade foram observados em experimentos de ataque iônico em superfícies de silício [24] e de grafite [25], e em processos de crescimento de filmes finos de ouro [46]. Quanto à microscopia de força atômica (*atomic force microscopy* – AFM), destacamos as análises do comportamento de escala da rugosidade em experimentos de crescimento epitaxial de GaAs [4], eletrodeposição de cobre [27], ataque químico em superfícies de silício [15] e crescimento de filmes de diamante [55]. Estudos por meio de espalhamento de raios-x rasantes também fornecem informações sobre o comportamento de escala da rugosidade em várias situações, como no crescimento de filmes finos de ZnO [28] e de FeN [62]. Além disso, através de vídeo-microscopia, algumas interfaces propagando-se em meios desordenados podem ser estudadas, como em combustão direcionada de papel [41] e também em experimentos de eletrodeposição [56].

A modelagem teórica tem fornecido uma fração substancial do que se conhece sobre processos de crescimento de interfaces. A formação de interfaces e superfícies é influenciada por um grande número de fatores, sendo quase impossível distinguir todos eles. No entanto, espera-se que haja um pequeno número de leis básicas que determinam a morfologia e a dinâmica de crescimento. A ação dessas leis básicas pode ser descrita com detalhe microscópico por meio de modelos discretos atomísticos de crescimento, modelos que imitam a Física essencial, mas que passam por cima de alguns dos detalhes menos essenciais. A maioria dos modelos é de fato bastante simples (por exemplo, muitos são definidos em redes), o que reflete o restrito conjunto de interações fundamentais dos fenômenos modelados. A componente probabilística envolvida nos modelos reflete nossa ignorância em relação a detalhes da interação, simplificando o fenômeno real. Isto nos permite formular o problema através do comportamento apenas estocástico de umas poucas variáveis que, à luz das propriedades de escala, obedecem às mesmas leis [58]. Estudos com simulações representam uma ligação essencial entre teoria e experimentos, permitindo separar os ingredientes fundamentais que determinam a morfologia

dos detalhes desnecessários.

Uma outra ferramenta eficiente introduzida para o entendimento do comportamento de vários processos de crescimento são as equações diferenciais estocásticas, que procuram descrever a evolução temporal de superfícies. Tais equações descrevem a interface em escala de comprimento grande, o que significa negligenciar os detalhes de escala de comprimento pequena, se concentrando em propriedades assintóticas (ou limite hidrodinâmico, em que as propriedades locais correspondem à médias sobre um volume contendo muitas partículas). Uma das tarefas iniciais na investigação de um novo problema na área é tentar derivar uma equação contínua de crescimento. Se já possuímos um modelo discreto para o sistema, gostaríamos de estar aptos a derivar a equação contínua correspondente diretamente desse modelo. Porém, há um método alternativo para a obtenção da equação de crescimento: explorar princípios de simetria. Todo processo de crescimento obedece a alguns princípios de simetria. Por exemplo, as leis da Física são independentes de onde definimos a altura zero da interface, de modo que a equação contínua também deve ser. Em muitos casos as propriedades de escala do sistema são determinadas de forma única por simetrias do sistema. Uma vez obtida a equação de crescimento, devemos buscar suas previsões, determinando por exemplo expoentes de escala e funções de escala. Se o processo de crescimento é descrito por uma equação suficientemente simples, podemos resolvê-la exatamente. No entanto, para muitas equações, tais como a equação KPZ em dimensões maiores que $d = 1$, discutida posteriormente, não existem soluções exatas, de modo que devemos utilizar várias aproximações (soluções numéricas, grupo de renormalização) para descobrir o comportamento de escala.

2.3 Conceitos de Escala

Inicialmente imaginemos um processo de deposição genérico, que leva ao crescimento de uma superfície rugosa. Consideremos um substrato sobre o qual incidem partículas na direção normal. Tais partículas interagem entre si, o que gera correlações no sistema e de modo geral suaviza a interface.

Em modelos de crescimento em rede [3,35,58], costumamos definir por superfície o conjunto de partículas no agregado que ocupam a posição mais alta em cada coluna em que foi subdividido o substrato, ou seja, é o conjunto discreto $\{h_i(t)\}$ das alturas de cada sítio i da rede no tempo t . Em redes hipercúbicas, O sistema é limitado a L^d

sítios, onde L é o comprimento da rede e d a dimensão do substrato.

A altura média da superfície, \bar{h} , é definida para uma dada configuração como:

$$\bar{h}(t) \equiv \frac{1}{L^d} \sum_i h(i, t), \quad (2.1)$$

e a largura de interface, que caracteriza a rugosidade da superfície, é dada pela raiz quadrática média das flutuações na altura:

$$w(L, t) \equiv \left\langle \left[\frac{1}{L^d} \sum_i [h(i, t) - \bar{h}(t)]^2 \right]^{1/2} \right\rangle. \quad (2.2)$$

Os parêntesis envolvendo o segundo membro na equação acima denotam uma média configuracional, ou seja, uma média sobre muitos depósitos diferentes. O processo de

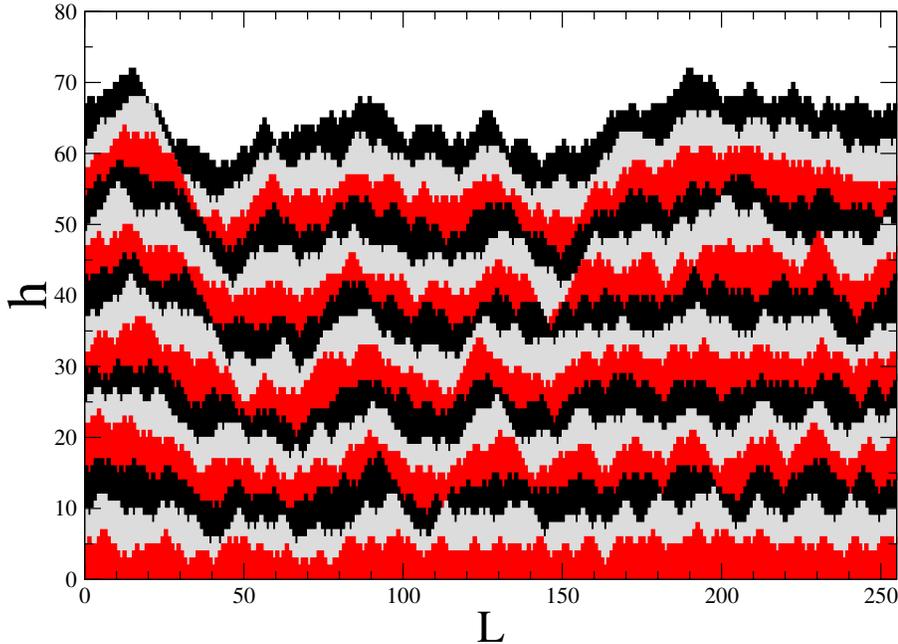


Figura 2.1: Processo de deposição para o modelo atômico RSOS unidimensional, com tamanho de rede $L = 256$. A alternância de cores ocorre a cada $10L$ tentativas de deposição. Note o aumento da rugosidade com o tempo.

evolução da rugosidade, portanto, pode ser quantitativamente monitorado medindo-se a largura de interface em função do tempo. Se iniciamos o crescimento com a superfície

do substrato lisa (por exemplo, uma linha horizontal reta, se $d = 1$), conforme se dá a deposição a interface gradualmente se torna rugosa, como exemplificado na figura 2.1 para o modelo RSOS unidimensional (definido no capítulo 3).

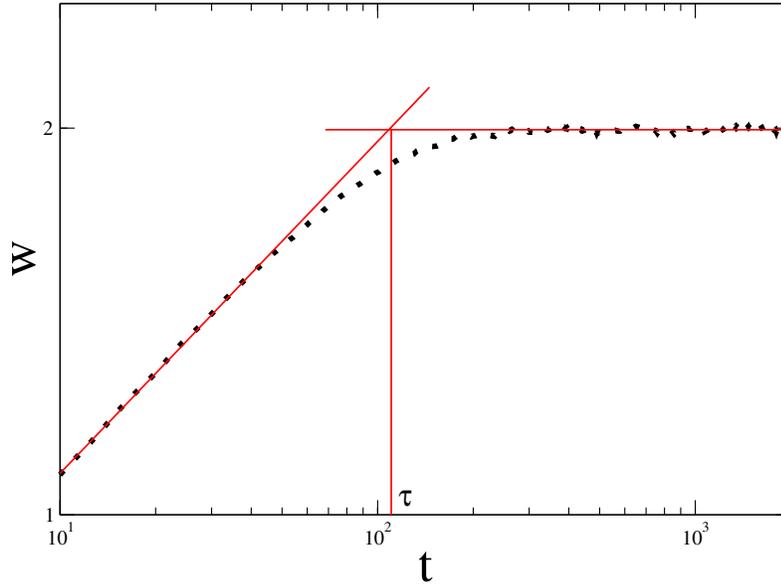


Figura 2.2: Comportamento típico da largura de interface com o tempo para modelos de deposição auto-afins (no caso, temos o modelo RSOS unidimensional com $L = 64$).

Um gráfico típico de evolução temporal da largura de interface apresenta duas regiões separadas por um tempo característico τ (chamado tempo de *crossover*), como na figura 2.2. Inicialmente a largura de interface (que passaremos a chamar de rugosidade, por simplificação) cresce segundo uma lei de potência temporal:

$$w(L, t) \sim t^\beta \quad [t \ll \tau]. \quad (2.3)$$

O expoente β é denominado expoente de crescimento, caracterizando a dinâmica dependente do tempo do processo de crescimento.

Mas o aumento da rugosidade não se dá indefinidamente, sendo seguido por um regime de saturação, durante o qual a largura de interface flutua em torno de um valor w_{sat} (veja a figura 2.2). Conforme se aumenta o tamanho do sistema, esse valor de

saturação também aumenta, ou seja,

$$w_{sat}(L) \sim L^\alpha \quad [t \gg \tau], \quad (2.4)$$

onde o expoente α é chamado de expoente de rugosidade, já que caracteriza a rugosidade da interface saturada.

O tempo de *crossover* ou tempo de saturação também depende do tamanho do sistema:

$$\tau \sim L^z, \quad (2.5)$$

z sendo chamado de expoente dinâmico, por caracterizar a mudança de comportamento do sistema. Este tempo de *crossover* pode ser definido formalmente a partir do cálculo do desvio (Δw) do valor médio da rugosidade de saturação w_{sat} :

$$\Delta w \equiv w_{sat} - w(t). \quad (2.6)$$

Por meio de gráficos $\ln \Delta w \times t$ para alguns modelos discretos de crescimento [52], observou-se um decaimento exponencial de w para w_{sat} da forma

$$\Delta w(t) = A \exp(-t/\tau), \quad (2.7)$$

com A e τ constantes. Em regiões destes gráficos com alta correlação linear (caracterizando portanto um decaimento do tipo exponencial) é possível estimar o tempo de relaxação τ por meio de ajuste linear. Em tais regiões:

$$\ln \Delta w(t) = -Bt + D \Rightarrow \Delta w(t) = A \exp(-Bt), \quad (2.8)$$

com B e D constantes e $B \equiv 1/\tau$.

O fato de o tempo de *crossover* τ e a largura de interface na saturação w_{sat} aumentarem com o tamanho do sistema indica que o fenômeno de saturação constitui um efeito de tamanho finito, ou seja, um efeito decorrente da limitação do tamanho do sistema. Isso ocorre porque as interações entre partículas depositadas geram correlações no sistema, quantificadas pelos comprimentos de correlação ξ_\perp e ξ_\parallel , medidos nas direções perpendicular e paralela ao substrato, respectivamente. Embora o processo de crescimento seja local, com as interações a informação acerca das alturas vizinhas a um

o dado sítio se propaga globalmente. O comprimento ξ_{\parallel} cresce com o tempo, e ao atingir o tamanho do sistema, toda a superfície se encontra correlacionada, o que resulta na saturação da largura de interface.

Os expoentes α , β e z não são independentes. Note na figura 2.2 que ao nos aproximarmos do ponto de *crossover* pela esquerda, temos, de acordo com a relação 2.3, que $w(\tau) \sim \tau^{\beta}$. No entanto, ao nos aproximarmos do mesmo ponto pela direita, temos, de 2.4, que $w(\tau) \sim L^{\alpha}$. Destas relações, $\tau^{\beta} \sim L^{\alpha}$, o que, segundo 2.5, implica em

$$z = \frac{\alpha}{\beta}, \quad (2.9)$$

uma lei de escala que relaciona os três expoentes e é válida para qualquer processo de crescimento que obedeça a relação de escala de Family-Vicsek, a qual passamos a discutir.

Em 1985, Family e Vicsek [17] propuseram uma relação de escala para a rugosidade que combina os regimes indicados em 2.3 e 2.4:

$$w(L, t) \approx L^{\alpha} f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (2.10)$$

onde a função de escala $f(x)$ se comporta como:

$$f(x) \sim \begin{cases} x^{\beta}, & \text{para } x \ll 1 \\ \text{cte}, & \text{para } x \gg 1 \end{cases}. \quad (2.11)$$

Tal relação permite colapsar dados para diferentes tamanhos de rede de deposição em uma mesma curva para modelos em que haja fracas correções aos comportamentos dominantes nas equações 2.3, 2.4 e 2.5. Para isso, considere o esquema da figura 2.3, que apresenta a largura de interface em função do tempo para sistemas de diferentes tamanhos (2.3a). Se dividirmos a rugosidade pelo seu valor no estado estacionário w_{sat} em cada um dos sistemas, as indicações de saturação das curvas ficarão num mesmo valor do eixo das ordenadas (como na figura 2.3b). A partir daí, dividindo o tempo t pelo tempo de saturação τ , todas as curvas passarão a saturar num mesmo valor das abscissas t/τ , colapsando portanto (figura 2.3c). Isto sugere que:

$$\frac{w(L, t)}{w_{sat}(L)} \approx g\left(\frac{t}{\tau}\right), \quad (2.12)$$

onde g é uma função com as mesmas propriedades de 2.11. Com as relações 2.4 e 2.5 obtemos a relação de escala de Family-Vicsek (FV).

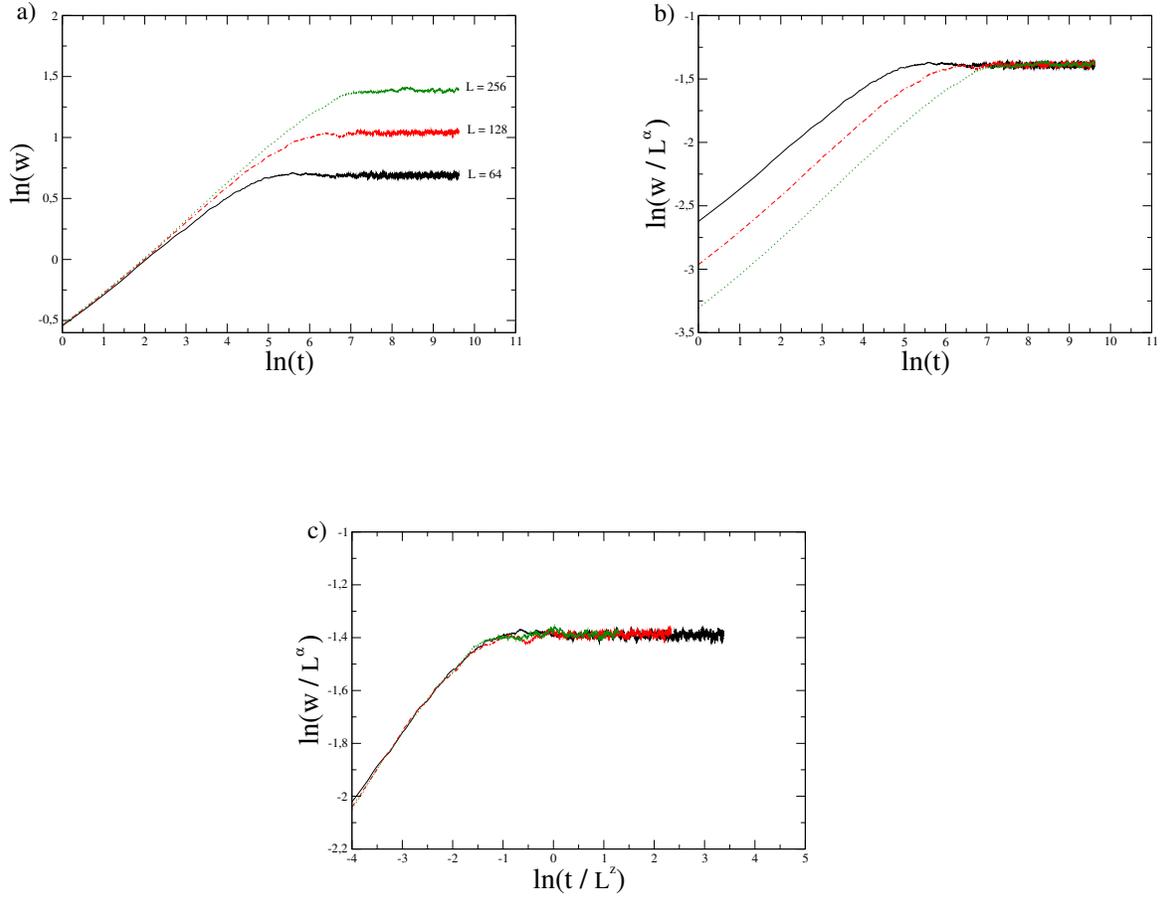


Figura 2.3: Etapas envolvidas na reescala da rugosidade dependente do tempo para o modelo RSOS unidimensional (tamanhos de rede $L = 64$, $L = 128$ e $L = 256$). De acordo com a relação FV, após as reescalas mostradas em b) e c), as curvas inicialmente distintas de a) colapsarão.

Podemos obter a relação 2.10 de um modo alternativo aplicando transformações de auto-afinidade:

$$L \rightarrow L' \equiv bL, \quad t \rightarrow t' \equiv b^z t, \quad \text{e} \quad w \rightarrow w' \equiv b^\alpha w. \quad (2.13)$$

Escrevendo a terceira relação acima utilizando as duas anteriores temos:

$$w(bL, b^z t) \equiv b^\alpha w(L, t), \quad (2.14)$$

válida para qualquer valor de b , em particular, $b = 1/L$, o que nos leva a

$$w\left(1, \frac{t}{L^z}\right) = \left(\frac{1}{L}\right)^\alpha w(L, t), \quad (2.15)$$

ou seja,

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

que é a relação procurada.

Uma relação equivalente à de Family-Vicsek pode ser obtida escolhendo-se outro valor para b em 2.14, de modo que $b^z t = 1$. Desse modo chegamos a

$$w(L, t) \sim t^\beta g\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (2.16)$$

onde

$$g(x) \sim \begin{cases} \text{cte}, & \text{para } x \ll 1 \\ x^{-\beta}, & \text{para } x \gg 1 \end{cases}, \quad (2.17)$$

para que os comportamentos observados de $w(L, t)$,

$$w(L, t) \sim t^\beta, \text{ para } t \ll L^z, \quad \text{e} \quad w(L, t) \sim L^\alpha, \text{ para } t \gg L^z, \quad (2.18)$$

sejam garantidos.

Cabe ressaltar que se espera que qualquer modelo discreto de deposição auto-afim (caracterizado por gerar superfícies correlacionadas) obedeça à relação de escala de Family-Vicsek. Porém, em muitos casos, termos subdominantes nas equações 2.3, 2.4 e 2.5 podem mascarar esta relação quando comparamos dados obtidos em pequenos tamanhos L [10].

Por último, atentamos para o fato de que a caracterização completa de uma interface depende não só da medida da rugosidade, mas da distribuição de alturas locais ou, alternativamente, dos momentos daquela distribuição. Porém, dada a inviabilidade de computarmos todos os momentos da distribuição ao longo da evolução da interface, devemos buscar o máximo possível de informações a seu respeito com base nas variáveis que nos são mais acessíveis.

Capítulo 3

Modelos de Crescimento e Classes de Universalidade

3.1 Introdução

Estamos interessados aqui em dois tipos básicos de modelos teóricos para processos de crescimento de interfaces: discretos e contínuos.

Em modelos discretos, a posição de cada partícula é bem definida. A modelagem de diferentes mecanismos de crescimento em nível microscópico é um método bastante utilizado para que se tenha uma noção mais abrangente sobre a natureza coletiva do movimento atômico (difusão) e de processos de deposição, entre outros. Por exemplo, a técnica de STM, capaz de identificar estruturas de rede e posições de átomos individuais, aliada a cálculos de primeiros princípios para energias envolvidas no movimento atômico sobre superfícies sólidas, tem motivado a proposição de muitos modelos discretos [12, 64].

Diferentemente, modelos contínuos “enxergam” a interface na escala hidrodinâmica ou de granulado-grosso (*coarse-grained*). Teorias contínuas buscam capturar os mecanismos essenciais que determinam a morfologia da interface. Seu poder de previsão é limitado a escalas de comprimento bem maiores que a distância interatômica típica entre as partículas envolvidas, nas quais fornece informação acerca da natureza coletiva do processo de crescimento, como a variação na rugosidade de superfície ou as funções

de correlação.

A classe de universalidade de um dado modelo atômico de crescimento dependerá do conjunto dos mecanismos que o originou e em geral está relacionada à determinada equação de crescimento.

3.2 Deposição Aleatória

Primeiramente apresentamos o mais simples dos processos de crescimento, o modelo de deposição aleatória (DA). Sua simplicidade nos permitirá determinar exatamente a rugosidade da interface em função do tempo e, a partir daí, os expoentes de escala, assim como construir uma equação de crescimento contínua equivalente, que nos leva aos mesmos expoentes.

A versão discreta deste modelo é definida como segue. Consideramos um substrato com L^d sítios (colunas) e altura inicial nula. A partir daí, uma coluna i da superfície é escolhida aleatoriamente e uma partícula cai verticalmente até atingir o topo desta coluna, onde se agrega permanentemente. Então o processo se repete (figura 3.1).

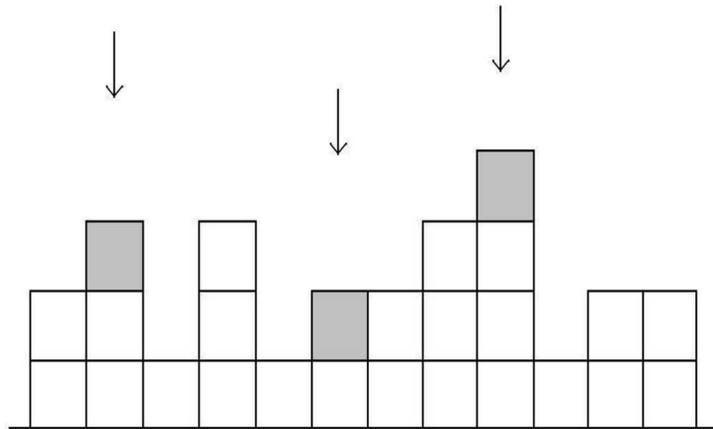


Figura 3.1: Regras de deposição para o modelo discreto DA. As setas representam partículas incidentes sobre pontos da rede aleatoriamente escolhidos, enquanto os quadrados hachurados indicam a situação final das mesmas após contato com a superfície.

Note que a interface gerada é decorrelacionada. As colunas crescem sem dependência entre si, não havendo, portanto, nenhum mecanismo que gere correlações ao longo da superfície. A interface resultante não é auto-afim, de modo que conceitos introduzidos no capítulo anterior (tais como a relação de Family-Vicsek) não se aplicam. Entretanto, o estudo do modelo será apresentado pois, além de sua simplicidade, pode ser considerado um primeiro passo na direção de processos de crescimento correlacionados mais realistas.

A fim de obtemos a solução exata do modelo, note que, como não existe correlação entre as colunas, cada uma cresce independentemente com probabilidade $p = 1/L$, onde L é o tamanho do sistema. A probabilidade de que uma coluna tenha altura h após a deposição de N partículas é dada por:

$$P(h, N) = \binom{N}{h} p^h (1-p)^{N-h}. \quad (3.1)$$

A altura média do depósito cresce linearmente no tempo (que é definido como o número médio de camadas depositadas, $t = N/L$):

$$\langle h \rangle \equiv \sum_{h=0}^N h P(h, N) = Np = \frac{N}{L} = t. \quad (3.2)$$

O cálculo do segundo momento também pode ser realizado diretamente:

$$\langle h^2 \rangle \equiv \sum_{h=0}^N h^2 P(h, N) = Np(1-p) + N^2 p^2. \quad (3.3)$$

A largura da interface (equação 2.2) é dada em termos do primeiro e do segundo momentos:

$$w^2(L, t) \equiv \frac{1}{L^d} \sum_i (h_i - \bar{h})^2 = \bar{h}^2 - \bar{h}^2 = \frac{N}{L} \left(1 - \frac{1}{L}\right). \quad (3.4)$$

Dado que $t = N/L$, da equação acima temos que $w(t) \sim t^{1/2}$ assintoticamente, logo

$$\beta = \frac{1}{2}. \quad (3.5)$$

É válido ressaltar que no modelo DA a rugosidade pode crescer indefinidamente com o tempo sem saturar, pois como não existem correlações nesse modelo, o comprimento de correlação ξ_{\parallel} é sempre zero, e o expoente α não é definido.

Ilustraremos agora um método alternativo à solução exata (a qual nem sempre é possível para outros modelos) para estudar a DA, que consiste em associar uma equação de crescimento estocástica ao processo de crescimento estudado. É necessária uma função contínua $h(\mathbf{x}, t)$ que descreva a altura no ponto \mathbf{x} no tempo t . Porém, note que a interface gerada pelo modelo discreto não é analítica; consiste de “saltos” discretos, não sendo diferenciável. Para obtermos uma descrição contínua, tomamos o limite em que serão consideradas apenas flutuações de altura da superfície cuja escala de comprimento seja maior que o espaçamento da rede. Neste limite hidrodinâmico, cada processo individual envolve um número considerável de partículas.

Considere a altura da interface $h(\mathbf{x}, t)$ em qualquer posição \mathbf{x} pertencente a um substrato d -dimensional. O crescimento pode ser descrito pela equação contínua

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = F + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (3.6)$$

Nesta equação, F é o número médio de partículas que chegam no sítio \mathbf{x} por unidade de tempo e $\eta(\mathbf{x}, t)$ reflete as flutuações aleatórias no processo de deposição, sendo um ruído aleatório com média configuracional zero

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 \quad (3.7)$$

e sem correlações no espaço e no tempo:

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D\delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \quad (3.8)$$

As propriedades estatísticas da equação 3.6 são as mesmas que as obtidas para a interface gerada por DA. Note que, integrando 3.6 no tempo, segue que

$$h(\mathbf{x}, t) = Ft + \int_0^t dt' \eta(\mathbf{x}, t'). \quad (3.9)$$

Para a dependência temporal da altura média temos, usando 3.7,

$$\langle h(\mathbf{x}, t) \rangle = Ft. \quad (3.10)$$

Tomando o quadrado de 3.9 e usando 3.8, obtemos $\langle h^2(\mathbf{x}, t) \rangle = F^2t^2 + 2Dt$. Portanto

$$w^2(t) = \langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 = 2Dt. \quad (3.11)$$

Desse modo chegamos ao mesmo expoente $\beta = 1/2$ que encontramos no cálculo exato. A deposição aleatória, descrita tanto pelo modelo discreto quanto pelo contínuo (equação de crescimento estocástica), forma uma classe de universalidade entre os fenômenos de crescimento de interfaces.

3.3 Deposição Aleatória com Relaxação Superficial - Modelo de Family

No modelo discreto de deposição aleatória com relaxação superficial, conhecido também como modelo de Family, consideramos um substrato com L^d sítios e altura inicial nula. Um sítio i desta superfície é escolhido aleatoriamente (como no modelo DA), e uma partícula cai verticalmente até atingir o topo da coluna desta posição escolhida, podendo difundir-se ao longo da superfície até uma distância finita m e parando na posição correspondente à altura mais baixa (mínimo local). Então o processo se repete (figura 3.2). Poderíamos interpretar o modelo de Family como um modelo no qual a agregação de partículas ocorreria em posições energeticamente mais favoráveis que, por exemplo, no modelo DA. Como resultado do processo de relaxação, a superfície seria suavizada.

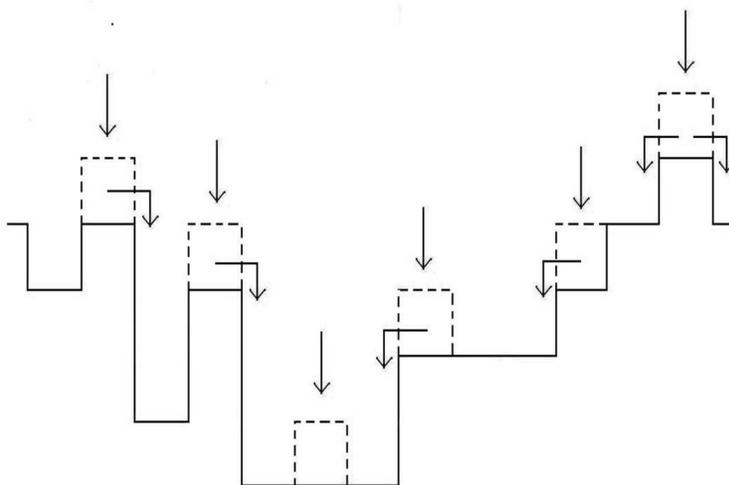


Figura 3.2: Regras para o modelo discreto de deposição aleatória com relaxação superficial. Átomos depositados sobre pontos da superfície deslocam-se para a coluna vizinha de menor altura.

Diferentemente do modelo DA, este gera uma superfície correlacionada, já que a partícula incidente compara as alturas de colunas próximas para então efetuar a agregação. A propagação dessas correlações acaba levando à saturação da interface. Não há uma solução exata para sua versão discreta. Simulações computacionais em dimensão $d = 1$ no trabalho original que propôs este modelo [18] resultaram nos expoentes de escala:

$$\alpha \approx 0.48, \quad \beta \approx 0.24. \quad (3.12)$$

Recentemente foi obtido para o expoente dinâmico o valor $z = 2$ em $d = 1$ e $d = 2$ [7]. Ainda em $d = 2$, simulações computacionais [52] revelam fraca divergência da rugosidade, compatível com $\alpha \approx 0$ e $\beta \approx 0$. Isto significa que a largura de interface escala de forma logarítmica com o tempo em tempos curtos,

$$w(L, t) \sim \log t, \quad t \ll \tau, \quad (3.13)$$

e, na saturação, cresce com o logaritmo do tamanho do sistema,

$$w_{sat}(L) \sim \log L, \quad t \gg \tau. \quad (3.14)$$

3.4 O Papel das Simetrias na Obtenção de Modelos Contínuos

Descrevemos agora um método sistemático para derivar a equação contínua que descreve um dado processo de deposição. A equação de crescimento para a interface deve ser a mais simples possível que seja compatível com as simetrias do problema.

Objetivamos descrever interfaces correlacionadas caracterizadas por sua altura $h(\mathbf{x}, t)$, que é univocamente determinada para cada ponto de seu domínio (isso equivale a dizer que não há partículas penduradas no agregado). Espera-se que uma equação de crescimento seja do tipo Langevin, ou seja, da forma

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = G(h, \mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (3.15)$$

onde $G(h, \mathbf{x}, t)$ é uma função geral que depende da altura da superfície, da posição e do tempo. Princípios de simetria impõem certas restrições a essa função geral.

Note que, para que uma equação estocástica descreva corretamente o processo de deposição estudado, ela não pode depender de onde definimos a origem do tempo, ou

de onde definimos a altura inicial da superfície, ou ainda de uma posição específica do substrato. Isso gera três simetrias básicas. Uma delas é a invariância sob translação temporal, o que significa que a equação deve ser preservada após a transformação $t \rightarrow t + \delta_t$. Isso exclui qualquer dependência temporal explícita em G . Também é necessário que haja invariância sob translação ao longo da direção de crescimento, ou seja, sob transformações do tipo $h \rightarrow h + \delta_h$, de forma que G não deve apresentar dependência explícita de h . Deve haver ainda invariância por translação na direção perpendicular à direção de crescimento, o que implica na simetria sob a transformação $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \delta_{\mathbf{x}}$, excluindo de G qualquer dependência explícita com a posição \mathbf{x} do substrato.

Além disso, é preciso que seja respeitada a simetria de inversão em relação à direção de crescimento, ou seja, transformações do tipo $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ não devem modificar 3.15. Essa condição exclui as derivadas ímpares nas coordenadas espaciais (termos como ∇h , $\nabla(\nabla^2 h)$, etc.).

Algumas interfaces possuem ainda simetria de reflexão, em que as flutuações de altura são semelhantes em relação à altura média, o que se traduz por invariância sob a transformação $h \rightarrow -h$. Esse tipo de simetria elimina potências pares de h (termos como $(\nabla h)^2$ ou $(\nabla h)^4$, mas permite termos como $\nabla^2 h$. A principal classe de modelos estudada nesta dissertação não obedece esta simetria.

3.5 Equação de Edwards e Wilkinson (EW)

Passemos então à discussão da equação de crescimento que descreve processos de deposição simples com relaxação superficial. Na seção anterior apresentamos as simetrias que devem ser obedecidas pelo modelo contínuo, de modo que, considerando todos os termos possíveis para 3.15, chegamos a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & (\nabla^2 h) + (\nabla^4 h) + \dots + (\nabla^{2n} h) + (\nabla^2 h) (\nabla h)^2 + \\ & + \dots + (\nabla^{2k} h) (\nabla h)^{2j} + \eta(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde n , k e j podem assumir qualquer valor inteiro positivo, e, para simplificar a notação, não foram indicados explicitamente os coeficientes diante de cada termo.

Dado que estamos interessados em propriedades de escala, consideramos o limite

hidrodinâmico ($t \rightarrow \infty, x \rightarrow \infty$) das funções que caracterizam a superfície. Neste limite, as derivadas de maior ordem em 3.16 tornam-se menos importantes que as derivadas de menor ordem, o que pode ser observado, entre outros métodos (como grupo de renormalização), por argumentos de escala. Comparemos, por exemplo, os termos $\nabla^2 h$ e $\nabla^4 h$. Ao fazermos as transformações de auto-afinidade $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' \equiv b\mathbf{x}$ e $h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h$, os termos mencionados serão reescalados por

$$\nabla^2 h \rightarrow \nabla'^2 h' \equiv b^{\alpha-2} \nabla^2 h \quad \text{e} \quad (3.17)$$

$$\nabla^4 h \rightarrow \nabla'^4 h' \equiv b^{\alpha-4} \nabla^4 h. \quad (3.18)$$

No limite hidrodinâmico ($b \rightarrow \infty$), o termo $\nabla^4 h$ tende a zero mais rapidamente que $\nabla^2 h$, de modo que o primeiro se torna irrelevante e podemos desconsiderá-lo. Analogamente, os termos $(\nabla^{2k} h) (\nabla h)^{2j}$ também podem ser desconsiderados frente a $\nabla^2 h$.

Com isso, a equação mais simples que poderia descrever a evolução de superfícies correlacionadas e com simetria de reflexão, proposta em 1982 por Edwards e Wilkinson [16], é a chamada equação EW:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (3.19)$$

onde ν representa a tensão superficial, já que o termo $\nu \nabla^2 h$ tende a suavizar a interface redistribuindo as suas irregularidades, enquanto mantém a altura média inalterada (em outras palavras, age como um mecanismo de relaxação conservativo).

Note que a velocidade média da interface é zero:

$$v \equiv \int_0^L d^d \mathbf{x} \left\langle \frac{\partial h}{\partial t} \right\rangle = 0, \quad (3.20)$$

pois na equação 3.19 são nulas tanto a contribuição do termo laplaciano (devido às condições periódicas de contorno) quanto do ruído (pela propriedade 3.7). Se a interface se move com velocidade não-nula, podemos adicionar um termo de velocidade a 3.19:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = v + \nu \nabla^2 h + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (3.21)$$

No entanto, o movimento uniforme gerado por esse termo não afeta as propriedades de escala da superfície, pois podemos retornar à equação 3.19 por meio da mudança

de variáveis $h \rightarrow h - vt$ (o que corresponderia a visualizar o processo por meio de um sistema de coordenadas que se move com velocidade v em relação ao substrato).

A fim de obter os expoentes de escala para a equação EW, utilizaremos argumentos de escala. Tal equação deve ser invariante sob as transformações de auto-afinidade:

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' \equiv b\mathbf{x}, \quad h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h, \quad \text{e} \quad t \rightarrow t' \equiv b^z t, \quad (3.22)$$

de modo que após a reescala, a interface resultante deve conservar as propriedades estatísticas que possuía originalmente. Substituindo as transformações acima em 3.19, obtemos:

$$b^{\alpha-z} \frac{\partial h}{\partial t} = \nu b^{\alpha-2} \nabla^2 h + b^{-\frac{d}{2}-\frac{z}{2}} \eta. \quad (3.23)$$

O termo de ruído na equação acima foi obtido reescalando-se 3.8 com 3.22, o que, lembrando da propriedade das funções delta $\delta^d(a\mathbf{x}) = \frac{1}{a^d} \delta^d(\mathbf{x})$, nos leva a

$$\langle \eta(b\mathbf{x}, b^z t) \eta(b\mathbf{x}', b^z t') \rangle = b^{-(d+z)} \langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle. \quad (3.24)$$

Multiplicando os dois membros de 3.23 por $b^{z-\alpha}$, temos:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu b^{z-2} \nabla^2 h + b^{-\frac{d}{2}+\frac{z}{2}-\alpha} \eta. \quad (3.25)$$

Para que a invariância de escala da equação EW seja garantida, cada termo do lado direito de 3.25 deve ser independente de b , o que implica nos expoentes:

$$\alpha = \frac{2-d}{2}, \quad \beta = \frac{2-d}{4}, \quad \text{e} \quad z = 2. \quad (3.26)$$

Outra maneira de encontrarmos os expoentes de escala para 3.19 é resolvendo-a exatamente, dado seu caráter linear, por análise de Fourier [49], o que nos leva aos mesmos valores para α , β e z .

Note que, para dimensão $d = 1$, temos $\alpha = 1/2$ e $\beta = 1/4$, em concordância com os resultados 3.12. De fato, a maneira como a tensão superficial reorganiza a altura da superfície é similar ao processo de relaxação usado no modelo discreto. Tal similaridade no mecanismo de relaxação e a coincidência dos expoentes para $d = 1$ nos leva a concluir que o modelo de Family pertence à mesma classe de universalidade definida, usualmente, pela equação EW (é a chamada classe EW).

Para $d = 2$, obtemos $\alpha = 0$ e $\beta = 0$ (note mais uma vez a compatibilidade com o modelo de Family). Para $d > 2$, os expoentes α e β são negativos, o que significa que a interface é lisa em larga escala. Qualquer irregularidade na superfície induzida pelo ruído é suprimida pela tensão superficial.

3.6 Processos com Crescimento Lateral - Deposição Balística

A deposição balística (DB) foi introduzida em 1959 por Vold [60, 61] como modelo para simular a estrutura de sedimentos formada na deposição de pequenas partículas em dispersão coloidal. Na versão em rede desse modelo, consideramos um substrato com L^d sítios e altura inicial nula. Cada partícula a ser depositada cai verticalmente em direção a um sítio i do substrato (escolhido aleatoriamente), agregando-se na posição de primeiro contato com a superfície (figura 3.3). Diferentemente dos modelos apresentados nas seções anteriores, este gera um agregado poroso. A velocidade de crescimento local agora tem uma componente na direção da normal local à interface, ou seja, as regras do modelo geram o que se chama de crescimento lateral.

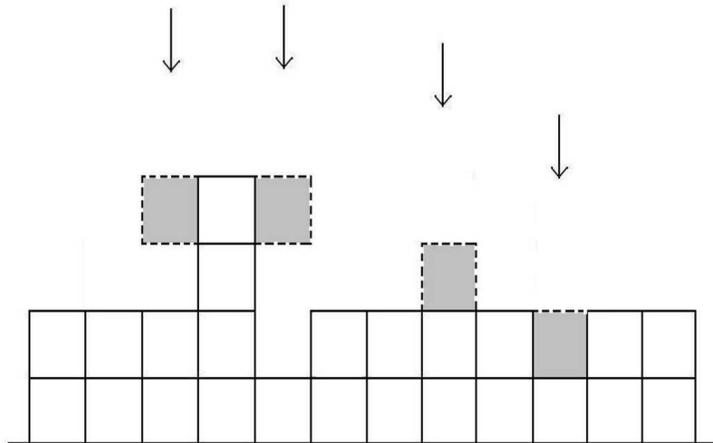


Figura 3.3: Modelo DB em sua versão original. A agregação ocorre no primeiro contato com um vizinho próximo.

Simulações numéricas recentes em $d = 1$ [51] apontam para os seguintes valores dos

expoentes de escala:

$$\alpha \approx 0.50, \quad \beta \approx 0.33, \quad (3.27)$$

enquanto muitos trabalhos numéricos anteriores sugeriam valores um pouco menores de α e β [14,17,26,42,43]. Em $d = 2$, embora efeitos de tamanho finito do modelo mascarem o valor assintótico do expoente de crescimento β [51], estimativas para o expoente de rugosidade apontam $\alpha \approx 0.38$ [53].

3.7 Equação de Kardar, Parisi e Zhang (KPZ)

A fim de buscar uma equação contínua que descreva o processo de deposição balística, primeiramente devemos perceber que a simetria de reflexão já não existe neste caso. Essa simetria é quebrada pela existência de uma força F perpendicular à interface, que seleciona uma direção particular de crescimento para a mesma, e que se faz representar, na deposição balística, pela propriedade de crescimento lateral.

Considere a adição de partículas em uma dada posição da superfície (figura 3.4). O crescimento ocorre na direção normal ao ponto que possui inclinação ∇h , gerando,

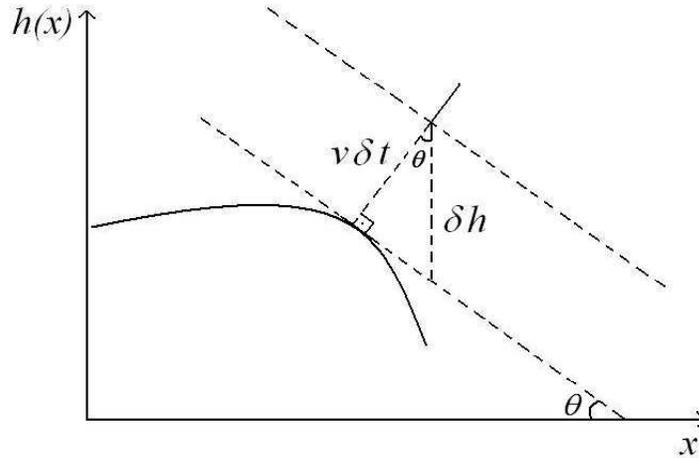


Figura 3.4: A origem do termo não-linear na equação KPZ.

após um intervalo de tempo infinitesimal δt , um aumento δh ao longo do eixo h dado pelo teorema de Pitágoras:

$$\delta h = [(v\delta t)^2 + (v\delta t\nabla h)^2]^{1/2} = v\delta t [1 + (\nabla h)^2]^{1/2}, \quad (3.28)$$

onde identificamos ∇h com a tangente do ângulo θ indicado na figura 3.4. A expressão acima pode ser expandida em uma aproximação para pequenos gradientes como

$$\delta h = v\delta t \left(1 + \frac{1}{2} (\nabla h)^2 + \dots \right), \quad (3.29)$$

de modo que

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = v + \frac{v}{2} (\nabla h)^2 + \dots \quad (3.30)$$

Isso sugere a presença de um termo não-linear da forma $(\nabla h)^2$ em 3.15 para denotar o crescimento lateral no processo. Incorporando este termo à equação EW, obtemos a generalização proposta em 1986 por Kardar, Parisi e Zhang, conhecida como equação KPZ [30]:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (3.31)$$

Esta é a equação mais simples que apresenta todas as simetrias discutidas na seção 3.3, exceto a simetria de reflexão. O coeficiente λ é chamado de velocidade excedente, já que, com a presença do termo não-linear, a velocidade média da superfície assume um valor diferente de zero:

$$v = \frac{\lambda}{2} \int_0^L d^d \mathbf{x} \langle (\nabla h)^2 \rangle. \quad (3.32)$$

O termo $(\nabla h)^2$ gera um aumento na altura do depósito pela adição de material à interface (ou retirada de material, se $\lambda < 0$), de modo que acaba sendo responsável pela velocidade excedente na equação 3.32.

Com a inclusão do termo não-linear em 3.19, além de os expoentes de escala serem alterados, os argumentos de escala utilizados para a equação EW na seção anterior não são mais suficientes para obtê-los. Note que, ao aplicarmos as transformações de escala 3.22 à equação KPZ, temos:

$$b^{\alpha-z} \frac{\partial h}{\partial t} = \nu b^{\alpha-2} \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} b^{2\alpha-2} (\nabla h)^2 + b^{-\frac{d}{2}-\frac{z}{2}} \eta. \quad (3.33)$$

Multiplicando ambos os membros por $b^{z-\alpha}$, chegamos a:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu b^{z-2} \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} b^{\alpha+z-2} (\nabla h)^2 + b^{-\frac{d}{2}+\frac{z}{2}-\alpha} \eta. \quad (3.34)$$

Para que a invariância de escala fosse assegurada, poderíamos supor que 3.34 fosse independente de b , porém isto nos leva à três relações de escala para dois expoentes,

gerando relações incompatíveis. Se argumentarmos que no limite $b \rightarrow \infty$ o termo não-linear domina sobre a tensão superficial (veja 3.33), poderíamos desconsiderar este último, mas ainda assim obteríamos valores incorretos dos expoentes de escala. Isso acontece porque, ao reescalar o sistema, os diferentes termos (ν , λ e D) na equação de crescimento não se renormalizam independentemente, estando acoplados entre si [3]. Contudo, por invariância galileana, mostraremos que a relação

$$\alpha + z = 2 \tag{3.35}$$

é válida para qualquer dimensão.

A propriedade de invariância galileana foi discutida inicialmente por Forster, Nelson e Stephen [22] no contexto de fluidos com agitação aleatória governados pela equação de Burgers com ruído:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \nu (\nabla \cdot \nabla) \mathbf{v} - \lambda \nabla \eta(\mathbf{x}, t), \tag{3.36}$$

onde $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ é a velocidade do fluido, ν é a viscosidade e $f = -\lambda \nabla \eta(\mathbf{x}, t)$ é uma força aleatória. Esta equação pode ser mapeada para a equação KPZ com a mudança de variáveis

$$\mathbf{v} = -\lambda \nabla h. \tag{3.37}$$

A equação de Burgers é invariante sob a transformação galileana:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{v}_0 + \mathbf{v}'(\mathbf{x} - \mathbf{v}_0 t, t), \tag{3.38}$$

invariância que transforma-se, para a equação KPZ, numa invariância pela inclinação da interface de um ângulo infinitesimal \mathbf{e} . Com as transformações:

$$h' \equiv h + \mathbf{e} \cdot \mathbf{x}, \quad \mathbf{x}' \equiv \mathbf{x} + \lambda \mathbf{e} t, \quad e \quad t' \equiv t, \tag{3.39}$$

a equação KPZ satisfaz:

$$\frac{\partial h'(\mathbf{x}', t')}{\partial t'} = \nu \nabla'^2 h' + \frac{\lambda}{2} (\nabla' h')^2 + \eta(\mathbf{x}', t'), \tag{3.40}$$

apresentando invariância galileana, já que o ruído descorrelacionado também é invariante [44]. Como as transformações 3.39 contêm explicitamente o coeficiente λ , para

que a invariância 3.40 seja preservada no limite hidrodinâmico, a operação de reescala 3.22 não pode alterar o valor de λ . Aplicando tal exigência em 3.34, segue a relação 3.35, que é confirmada por métodos de grupo de renormalização. Em $d = 1$, Kardar, Parisi e Zhang [30] obtiveram os expoentes

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{1}{3}, \quad \text{e} \quad z = \frac{3}{2}, \quad (3.41)$$

valores assegurados no limite $\nu \nabla^2 h \ll \lambda (\nabla h)^2$, no qual há domínio do termo não-linear. Para dimensões superiores, os expoentes são obtidos apenas por soluções aproximadas, numéricas ou de grupo de renormalização. Em $d = 2$, alguns trabalhos apontam o valor $\alpha \approx 0.38$ para o expoente de rugosidade [9].

Uma comparação com os expoentes obtidos numericamente para o modelo DB em $d = 1$ e $d = 2$ (seção anterior) sugere que de fato este modelo discreto e a equação KPZ pertençam à mesma classe de universalidade, usualmente chamada de classe KPZ.

3.8 Outros Modelos Discretos na Classe KPZ

Além do modelo de deposição balística apresentado na seção 3.6, existem outros que também pertencem à classe de universalidade KPZ. Naquela seção, foi apresentado o modelo DB em sua versão mais simples, conhecida como NN (nearest neighbor, ou vizinho mais próximo). Uma versão DB alternativa, chamada NNN (next-nearest neighbor, ou próximo vizinho mais próximo), é bem parecida com a anterior, com a diferença de que a agregação pode acontecer com vizinhos diagonais (figura 3.5). Como o termo não-linear de 3.31 está presente para ambas as versões (crescimento lateral), suas propriedades de escala são descritas pela teoria não-linear. Encontram-se portanto na mesma classe de universalidade, possuindo os mesmos expoentes de escala α , β e z [42]. Porém, parâmetros não-universais, como o coeficiente λ , são diferentes: $\lambda \approx 1.30$ e 1.36 , para os modelos NN e NNN, respectivamente [34].

Outro modelo de crescimento cujas propriedades de escala são descritas pela equação KPZ foi introduzido em 1961 por Eden [50] para representar colônias celulares, tais como bactérias. O modelo original foi definido considerando-se inicialmente uma rede com uma partícula (semente) na origem. A partir daí, uma nova partícula é adicionada

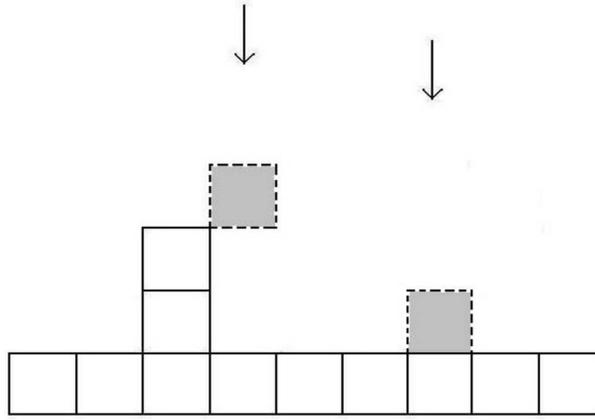


Figura 3.5: Regras de deposição para o modelo DB em sua versão NNN. Agregação possível com vizinhos diagonais.

a um sítio vizinho à semente escolhido aleatoriamente, formando um agregado (*cluster*) de dois sítios. Então, é escolhido um novo sítio dentre os que contornam o *cluster*, havendo agregação de outra partícula, e assim por diante. Como resultado, forma-se um agregado compacto, com perímetro rugoso. A fim de se estudar as propriedades de interface do modelo, é conveniente iniciar o crescimento a partir de uma linha inteira de sementes. Há três versões do modelo de Eden, que diferem na regra microscópica de escolha do sítio a ser crescido. Todas essas variações do modelo discreto original indicam expoentes da classe KPZ [29].

A classe de modelos conhecida como SOS (*solid-on-solid*, ou sólido-sobre-sólido) foi introduzida de modo a minimizar efeitos de correção de escala apresentados por muitos modelos discretos. Considera-se a altura em cada ponto do substrato univocamente determinada (não há partículas dependuradas) e, em alguns casos, a diferença de altura entre sítios vizinhos limitada, de forma que são eliminadas inclinações fortes. Modelos deste tipo são muito úteis na determinação de expoentes de escala em dimensões superiores a $d = 1$. Um exemplo é o modelo *single-step* (passo-único), pertencente à classe KPZ [42], e definido da seguinte maneira: no instante inicial a interface é serrilhada, com altura $h_{2i} = 0$ e $h_{2i+1} = 1$, onde $i = 0, \dots, L/2$. O crescimento ocorre com probabilidade p_+ em cada mínimo local, resultando em $h_i \rightarrow h_i + 2$. A interface pode ter sua altura diminuída (dessorção) num dado sítio i , desde que este seja um máximo local. A

dessorção acontece em máximos locais com probabilidade p_- , resultando em $h_i \rightarrow h_i - 2$ (figura 3.6). O fato de se escolher apenas mínimos (máximos) para a deposição (des-

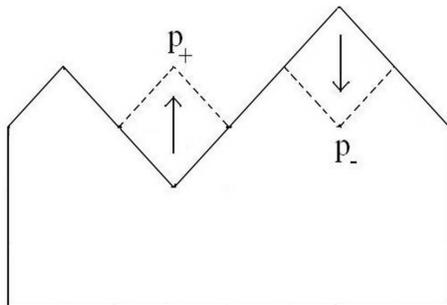


Figura 3.6: Ilustração das regras de crescimento para o modelo *single-step*.

sorção) garante que a diferença de altura entre dois sítios vizinhos seja unitária em qualquer estágio do processo de crescimento. A atualização pode ser seqüencial (um sítio por vez) ou paralela (todos os sítios passíveis de mudança sofrem deposição ou desorção de acordo com as probabilidades estabelecidas simultaneamente), o que não afeta os expoentes de escala, embora alguns parâmetros possam depender do método de simulação [3].

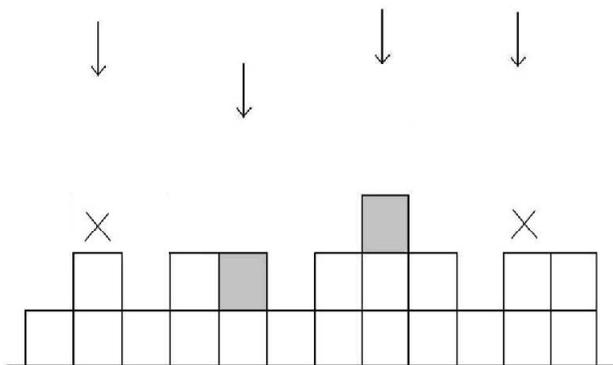


Figura 3.7: Regras estocásticas para o modelo RSOS.

Outro modelo SOS também na classe KPZ [52], introduzido por Kim e Kosterlitz [32],

é o modelo com recusa conhecido como RSOS (*restricted solid-on-solid*, ou sólido-sobre-sólido restrito). Um sítio i (aleatoriamente escolhido) de uma interface d -dimensional tem sua altura aumentada de uma unidade, $h_i \rightarrow h_i + 1$, desde que em cada estágio do processo de crescimento seja satisfeita a condição $|\Delta h| = 0, 1$ entre o sítio selecionado e seus vizinhos mais próximos, de forma que a diferença de altura entre sítios adjacentes não possa ser superior a 1 (figura 3.7).

Um terceiro exemplo de modelo SOS é o modelo de *etching* (erosão) proposto por Mello, Chaves e Oliveira para descrever a dissolução de um sólido cristalino por um líquido [45]. Soluções numéricas em $d = 1$ [45] e $d = 2$ [53] confirmam a classe KPZ para este modelo. Em sua versão de crescimento, a cada tentativa de deposição um sítio i (altura h_0) é escolhido aleatoriamente. Sua altura é incrementada de uma unidade, $h_i \rightarrow h_0 + 1$, e quaisquer dos sítios adjacentes cuja altura seja menor que h_0 têm sua altura aumentada para tal valor (figura 3.8). Na versão de *etching* real deste modelo, as alturas dos sítios teriam decrescido da maneira descrita. Porém, ao longo deste trabalho, ao nos referirmos ao modelo de *etching* teremos sempre em mente sua versão de crescimento.

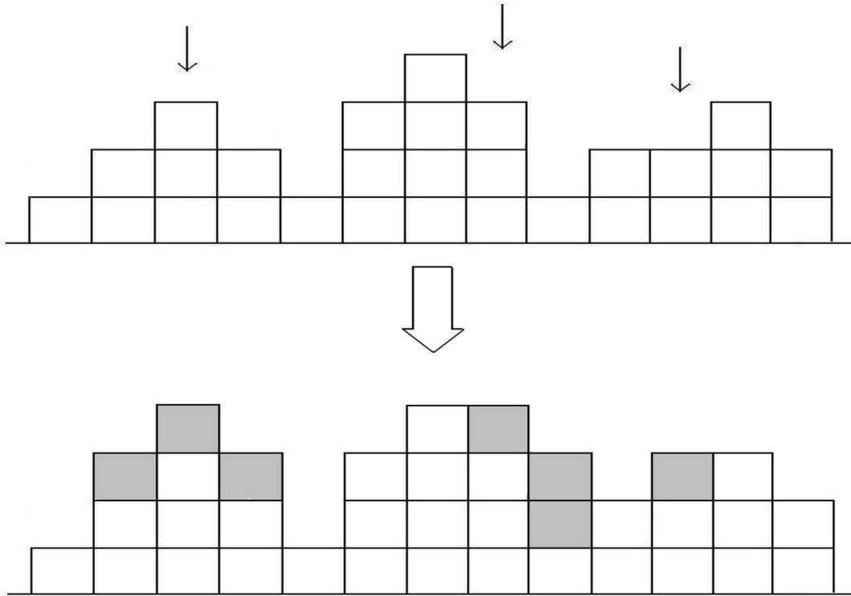


Figura 3.8: Versão de crescimento para o modelo de *etching*.

Capítulo 4

Modelos KPZ em Dimensões Superiores a $d = 1$

4.1 Introdução

Algumas questões permanecem em aberto acerca da classe de universalidade KPZ, dado o caráter não-linear deste modelo teórico. Neste capítulo abordaremos duas destas questões: a existência ou não de uma dimensão crítica superior para a equação KPZ, e a possibilidade de os modelos discretos desta classe de universalidade possuírem distribuições de alturas universais.

O estabelecimento destes problemas, assim como abordagens anteriores nesse sentido, serão considerados nas seções 4.2 e 4.3. Nossa proposta de trabalho, métodos de simulação, análise de dados e resultados serão tratados nas seções posteriores.

4.2 Modelos KPZ em $d = 2$ - Resultados Anteriores

Já comentamos que os expoentes de escala para a equação KPZ são conhecidos em $d = 1$. Porém, ainda não foram obtidos valores exatos em duas ou mais dimensões. Dado que muitos modelos discretos de crescimento pertencem a tal classe de universalidade (ver seção 3.8), simulações são utilizadas com freqüência para estimá-los.

Em $d = 2$, os primeiros valores divulgados para o expoente de rugosidade α variavam de $\alpha = 0.37$ a $\alpha = 0.4$ [1,13,21,32,38], o que era confirmado por soluções numéricas

para a equação KPZ [2,6,23,48].

Em 1998, assumindo certas propriedades de funções de correlação de alturas, Lässig obteve a seguinte condição de quantização para o expoente de rugosidade α [37]:

$$\alpha = \frac{2}{k_0 + 2}, \quad (4.1)$$

onde k_0 é um número inteiro ímpar para dimensão $d \geq 2$. Observe que, associada com a relação 3.35, tal condição limita também os valores dos outros expoentes KPZ. A equação 4.1 nos leva a $\alpha = 2/5$ como a única solução consistente com a faixa de estimativas numéricas. Outra consequência de seu trabalho foi que os momentos da distribuição de alturas no estado estacionário,

$$w_n \equiv \left\langle (h - \bar{h})^n \right\rangle, \quad (4.2)$$

obedeceriam a propriedade de *power-counting* (contagem de potência), ou seja, a relação de escala $w_n \sim L^{n\alpha}$ (note que o segundo momento é a largura de interface ao quadrado w^2). Além disso, a validade de suas proposições requer que a distribuição de alturas no estado estacionário seja assimétrica (terceiro momento não-nulo), ao contrário do caso unidimensional, cuja distribuição é gaussiana.

Resultados numéricos recentes de Chin e den Nijs para dois modelos KPZ com restrição na diferença de alturas (RSOS e BCSOS) foram consistentes com $\alpha = 0.4$ [8], mas simulações extensas de Marinari et al. para o modelo RSOS excluíram tal valor [39]. Um estudo recente da equação KPZ na aproximação de acoplamento de modos forneceu a estimativa $z \approx 1.62$ [9]. O expoente $\alpha \approx 0.38$ foi obtido para um modelo de *etching*, após uma análise detalhada de correções de tamanho finito [53]. No mesmo trabalho, obteve-se $\beta \approx 0.23$ e, calculando-se independentemente tempos de relaxação, $z > 1.6$.

Controvérsias à parte, vários trabalhos [8,39,53,57] confirmam a propriedade de *power-counting* para modelos com restrição na diferença de alturas e sugerem que o coeficiente de assimetria (*skewness*)

$$S \equiv \frac{w_3}{w_2^{3/2}} \quad (4.3)$$

e a curtose

$$Q \equiv \frac{w_4}{w_2^2} - 3 \quad (4.4)$$

são universais no estado estacionário. Grosso modo, o coeficiente de assimetria mede a assimetria da distribuição de alturas, enquanto a curtose avalia o peso contido nas “caudas” de tal distribuição relativamente a uma gaussiana. De acordo com Chin e den Nijs, os valores universais do coeficiente de assimetria e da curtose seriam independentes do sinal do coeficiente λ do termo não-linear da equação KPZ. Posteriormente, Reis confirmou a universalidade do coeficiente de assimetria e da curtose no estado estacionário também em modelos que não apresentam restrição na diferença de alturas, como o modelo de *etching*, observando, porém, que o sinal de S muda de acordo com o coeficiente λ [53]. De fato, note que a equação KPZ é invariante sob as transformações $h \rightarrow -h$ e $\lambda \rightarrow -\lambda$, mantendo os outros parâmetros inalterados, e que estas transformações mudam o sinal do coeficiente de assimetria. Conseqüentemente, espera-se que o sinal de S esteja relacionado ao de λ , como observado anteriormente em regimes de crescimento de sistemas KPZ unidimensionais [34].

Dado o interesse em possíveis valores universais das quantidades S e Q , o que denotaria a existência de distribuições de altura universais para diferentes modelos KPZ, cremos ser válido investigar tal propriedade em dimensões superiores a $d = 2$.

4.3 Dimensão Crítica Superior para a Equação KPZ

Para dimensões $d > 2$ existem dois regimes distintos separados por um valor crítico do coeficiente de não-linearidade λ . No regime de acoplamento fraco ($\lambda < \lambda_c$) o termo não-linear é irrelevante e o comportamento de escala é governado pelo ponto fixo $\lambda = 0$. Assim, a escala da equação linear Edward-Wilkinson (cujos expoentes são conhecidos exatamente) é recuperada. Por outro lado, o comportamento da equação KPZ no regime de acoplamento forte ($\lambda > \lambda_c$) é controverso. Muito esforço tem sido feito para que se torne clara a questão da existência de uma dimensão crítica superior d_c para a equação KPZ. Para $d < d_c$, o termo não-linear da equação KPZ é relevante para a obtenção dos expoentes de escala. A partir da dimensão crítica superior, no entanto, tal termo se tornaria irrelevante, os expoentes se reduzindo aos da equação

EW. Ou seja, as superfícies KPZ apresentam rugosidade logarítmica em L ou tendem a uma constante ($\alpha = 0$), para qualquer λ , a partir da dimensão crítica superior (isso equivaleria a dizer que $\lambda_c \rightarrow \infty$).

Estudos numéricos a esse respeito, tanto por meio de estimativas dos expoentes de escala [39] como pela avaliação das distribuições da largura de interface ao quadrado na saturação $w_{2_{sat}}$ para diferentes dimensões [40], não têm encontrado evidências de um valor finito para d_c . No entanto, existem argumentos analíticos a favor da existência de tal dimensão crítica superior, apontando o valor $d_c = 4$ [9, 36]. Em seu trabalho [9], Colaiori e Moore levantam ainda a hipótese de as simulações numéricas feitas até então não terem atingido tempos suficientemente longos para que de fato se chegasse ao regime de saturação em dimensões elevadas ($d \geq 4$). Dado que seus resultados para o expoente de escala z são compatíveis com as simulações de nosso grupo de trabalho em $d = 2$ [53], seria interessante abordarmos esta questão simulando modelos KPZ em dimensão $d = 4$.

4.4 Modelos KPZ em $d = 3$ - Resultados Obtidos

Passemos então à exposição de nossos resultados para modelos KPZ em dimensão $d = 3$. Simulamos dois modelos pertencentes a esta classe de universalidade: o de *etching* e o RSOS, cujas regras estocásticas de deposição já foram descritas na seção 3.8.

O modelo de *etching* foi simulado em redes de comprimento $L = 2^n$, com n inteiro variando de $n = 2$ ($L = 4$) a $n = 7$ ($L = 128$), até o regime de saturação da largura de interface (estados estacionários). Para os tamanhos menores ($L = 4$ a $L = 32$) cerca de 10^5 depósitos foram crescidos. Para $L = 64$ foram simulados 3.2×10^3 depósitos e para o maior tamanho de rede obtivemos 130 realizações. A diminuição da quantidade de depósitos com o aumento do tamanho das redes de deposição denota o tempo computacional necessário para que se atinja as regiões de saturação de forma confiável. Este fator acaba por restringir os tamanhos L passíveis de serem simulados. Cabe observar que, para o maior tamanho de rede trabalhado, eram necessários aproximadamente três dias de simulação em um processador de 1.53 MHz para a geração de um único depósito.

Também trabalhamos com o modelo RSOS em redes de comprimento $L = 2^n$, com $n = 2$ a $n = 7$. Este modelo mostrou-se computacionalmente mais dispendioso (exige mais tempo para a simulação de um dado depósito) que o modelo de *etching*, de forma que a quantidade de depósitos realizados foi menor que no caso anterior. Para $L = 4$ a $L = 32$ obtivemos da ordem de 10^5 depósitos. Para $L = 64$ foram simulados 6.8×10^2 depósitos, e para o maior tamanho de rede ($L = 128$) foram crescidos 40 depósitos (para este tamanho de rede um depósito era gerado em aproximadamente quatro dias por processador). Para este modelo, devido ao número relativamente baixo de depósitos para $L = 128$, as quantidades calculadas com base neste tamanho de rede para a obtenção dos expoentes α e z apresentam barras de erro demasiadamente grandes, de modo que perdem sua confiabilidade. Desse modo, serão retiradas de nossas considerações posteriores. Cálculos envolvendo este tamanho de rede estarão presentes apenas nas estimativas do coeficiente de assimetria S e da curtose Q .

Primeiramente estimamos o expoente de rugosidade α , o que pode ser feito a partir das larguras de saturação médias. Na região estacionária, o intervalo das distribuições de largura de interface é grande, de modo que computamos médias sobre muitas configurações diferentes para obtermos estimativas dos momentos w , w_2 , w_3 e w_4 no regime de saturação com significativa precisão. Foi necessário também calcular estas quantidades sobre diferentes intervalos de tempo para nos assegurar que os valores flutuam em torno da média, não aumentando significativamente com o tempo (o que sugeriria que a região de saturação não foi alcançada).

Como primeiro passo para a obtenção do expoente α consideremos a equação 2.4. Partindo de dois tamanhos de rede distintos para eliminar a constante de proporcionalidade, temos:

$$\begin{cases} w_{2_{sat}}(L) &= CL^{2\alpha} \\ w_{2_{sat}}(L/2) &= C(L/2)^{2\alpha} \end{cases} \Rightarrow \frac{w_{2_{sat}}(L)}{w_{2_{sat}}(L/2)} = 2^{2\alpha}, \quad (4.5)$$

de onde segue a expressão para o cálculo dos expoentes de rugosidade efetivos $\alpha_L^{(2)}$:

$$\alpha_L^{(2)} = \frac{\ln [w_{2_{sat}}(L)/w_{2_{sat}}(L/2)]}{2\ln 2}. \quad (4.6)$$

Chamamos os valores obtidos desta forma de expoentes efetivos pois em geral apre-

sentam efeitos de tamanho finito (que são tanto maiores quanto menores os tamanhos de rede trabalhados). É esperado que haja a convergência de tais valores efetivos para um valor assintótico na medida em que os tamanhos de rede forem aumentados, já que isso implica a redução progressiva dos indesejáveis efeitos de tamanho finito.

Também consideramos expoentes de rugosidade efetivos com base no quarto momento da distribuição de alturas w_4 , tendo em vista a propriedade de *power-counting* (seção 4.2) que nos leva a $w_{4_{sat}}(L) = CL^{4\alpha}$. Com desenvolvimento análogo ao que levou à equação 4.6, obtemos:

$$\alpha_L^{(4)} = \frac{\ln [w_{4_{sat}}(L)/w_{4_{sat}}(L/2)]}{4\ln 2}. \quad (4.7)$$

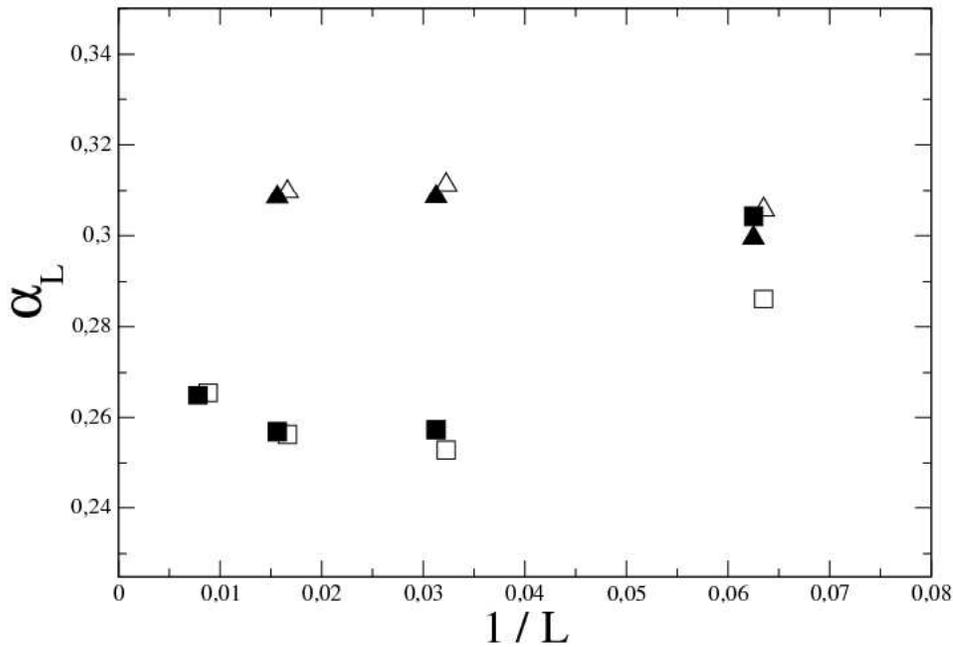


Figura 4.1: Expoentes de rugosidade efetivos $\alpha_L^{(2)}$ (representados por quadrados e triângulos cheios para os modelos de *etching* e RSOS, respectivamente) e $\alpha_L^{(4)}$ (quadrados e triângulos vazios) em $d = 3$. Os expoentes $\alpha_L^{(4)}$ foram deslocados de 0.001 no eixo das abscissas.

Na figura 4.1 mostramos os expoentes efetivos $\alpha_L^{(2)}$ e $\alpha_L^{(4)}$ para os modelos de *etching* e RSOS. Para os dois modelos, indicamos os pontos correspondentes a tamanhos de

rede $L \geq 8$. Note que os dados apontam para um valor assintótico α em torno de 0.3. O modelo RSOS sugere α pouco acima de 0.3, enquanto para o modelo de *etching* as correções de tamanho finito são muito fortes: $\alpha_L^{(2,4)}$ decresce com L até $L = 32$ e a partir daí cresce com L .

No já comentado trabalho de Lässig [37] (seção 4.2), de acordo com a condição de quantização proposta (equação 4.1) temos como valores mais prováveis, em $d = 3$, $\alpha = 2/7 \approx 0.286$ ou $\alpha = 2/9 \approx 0.222$, equivalente a considerarmos $k_0 = 5$ e $k_0 = 7$, respectivamente. Os resultados de nossa simulação descartam este último valor para o expoente de rugosidade, mas $\alpha = 2/7$ se enquadraria como um possível valor assintótico. Contudo, não podemos afirmar que de fato o seja, pois isto exigiria a simulação em tamanhos de rede maiores que os efetuados aqui, além do que os resultados para o modelo RSOS parecem excluir também este último valor.

Tentamos ainda analisar nossos dados considerando um outro tipo de correção de tamanho finito, chamada largura intrínseca, que é um termo constante adicional w_I^2 na relação de escala dinâmica 2.10 para a largura de interface quadrada:

$$w^2(L, t) = w_I^2 + L^{2\alpha} g(tL^{-z}), \quad (4.8)$$

onde g é uma função de escala com as propriedades de 2.11. A largura intrínseca representa contribuições das flutuações de escala de comprimento pequeno, de modo que é esperado que apareça em modelos com grandes diferenças de alturas locais, que é o caso do modelo de *etching*. A presença da largura intrínseca já foi considerada anteriormente em estudos numéricos de modelos KPZ [31,47,53,63]. Tal procedimento, porém, não nos forneceu resultados satisfatórios, provavelmente porque as larguras de interface na saturação para os tamanhos de rede simulados do modelo de *etching* possuem valores muito próximos da unidade. Isto acaba comprometendo o método, cuja aplicação é mais apropriada para modelos com valores de rugosidade mais expressivos, como por exemplo o próprio modelo de *etching* em $d = 2$ [53], onde foi observada uma dependência mais fraca dos expoentes efetivos α_L com o tamanho de rede L quando a rugosidade intrínseca foi levada em conta. Infelizmente, os tamanhos L que nos levariam a maiores valores de rugosidade se mostraram computacionalmente inviáveis,

de modo que descartamos este procedimento.

Passamos então à obtenção do expoente dinâmico z . A princípio, para estimá-lo deveríamos conhecer o tempo de saturação τ , o que nos permitiria utilizar a equação 2.5 para calcular expoentes efetivos z_L de modo semelhante ao feito anteriormente na estimativa de α :

$$\begin{cases} \tau(L) &= DL^z \\ \tau(L/2) &= D(L/2)^z \end{cases} \Rightarrow \frac{\tau(L)}{\tau(L/2)} = 2^z, \quad (4.9)$$

o que nos levaria a

$$z_L = \frac{\ln [\tau(L)/\tau(L/2)]}{\ln 2}. \quad (4.10)$$

Poderíamos fazer isso, já que nossos dados possibilitam o cálculo do desvio Δw do valor médio da rugosidade w_{sat} , o que nos permitiria utilizar o procedimento descrito na seção 2.3 para o cálculo de τ . Entretanto, utilizamos um método alternativo [52], aplicado com sucesso na análise de outros modelos [10, 53], que passamos a descrever.

Observe que a equação de Family-Vicsek pode ser escrita como

$$w \approx L^\alpha f\left(\frac{t}{\tau}\right) = w_{sat} g\left(\frac{t}{\tau}\right). \quad (4.11)$$

Se definirmos um tempo característico τ_0 a partir de

$$\frac{w(\tau_0)}{w_{sat}} = k, \quad (4.12)$$

com k constante, de modo que esta relação seja válida para qualquer L , temos que $\tau_0/\tau = \text{cte}$, (já que $g(t/\tau)$ é monotonicamente crescente no intervalo considerado) ou seja, τ_0 é proporcional ao tempo de *crossover* τ . Devido a esta proporcionalidade entre τ_0 e τ , os expoentes efetivos z_L são dados por (veja a equação 4.10):

$$z_L = \frac{\ln [\tau_0(L)/\tau_0(L/2)]}{\ln 2}, \quad (4.13)$$

e devem ser independentes da escolha particular da constante k . Já foi observado em trabalhos anteriores [52] que as estimativas de τ_0 mostram-se mais precisas do que os tempos de relaxação obtidos a partir de gráficos $\ln \Delta w \times t$. Além disso, outra desvantagem na obtenção de τ por meio de ajuste linear é que o tempo de *crossover* tem de ser estimado em diferentes intervalos de tempo, para que sejam evitados efeitos espúrios provenientes de uma escolha arbitrária da região de ajuste.

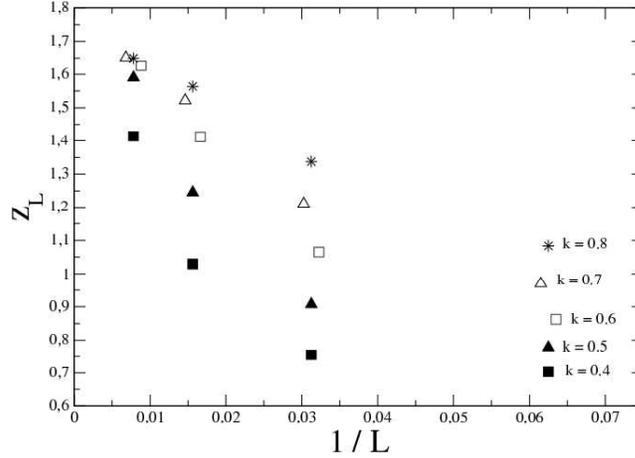


Figura 4.2: Efeitos sobre os expoentes dinâmicos efetivos z_L devido a mudanças na constante k para o modelo de *etching* em $d = 3$. Os pontos referentes a $k = 0.6$ e $k = 0.7$ foram deslocados de 0.001 no eixo das abscissas.

Consideramos os seguintes valores de k (equação 4.12): 0.4, 0.5, 0.6, 0.7 e 0.8. Observe a figura 4.2, onde é mostrada a evolução do expoente dinâmico efetivo para o modelo de *etching*, para os diferentes valores de k considerados. Vemos que z_L depende fortemente da constante k escolhida para os menores tamanhos de rede, dependência que diminui na medida em que L aumenta. Note ainda que para $k = 0.4$ e $k = 0.5$, os valores efetivos z_L se distanciam um pouco dos z_L correspondentes a $k = 0.6$, 0.7 e 0.8. Isso ocorre provavelmente porque, para o modelo de *etching* nesta dimensão, a convergência de $w_2(t)$ para os valores de saturação é rápida, fazendo com que os tempos τ_0 sejam da ordem da unidade para os menores tamanhos de rede, e pouco superiores a isto para os maiores tamanhos trabalhados (~ 10). Para os menores k , não esperamos que os tempos obtidos nos levem a boas estimativas de z , já que correspondem a tempos distantes do processo de saturação. Para os maiores tamanhos de rede, os maiores valores de k possuem valores bem próximos, pois nessa faixa τ_0 começa a assumir valores maiores, condição favorável para melhor aplicabilidade do método de cálculo descrito acima. Note que a relação 2.5, e portanto $\tau_0 \sim L^z$, é assintótica (tanto melhor quanto maior o tamanho de rede), o que acaba exigindo valores expressivos

para τ_0 ($L \rightarrow \infty$ implica $\tau_0 \rightarrow \infty$).

Para o modelo RSOS, o comportamento de z_L para os vários k é mostrado na figura 4.3. Podemos observar uma menor dependência dos maiores tamanhos de rede com a constante k . Possivelmente, isso ocorre por ser o processo de saturação mais lento para este modelo, o que leva a valores um pouco maiores de τ_0 já a partir de $L = 16$ ($\tau_0 \sim 10$ para $L = 16$ e $\tau_0 \sim 10^2$ para $L = 64$).

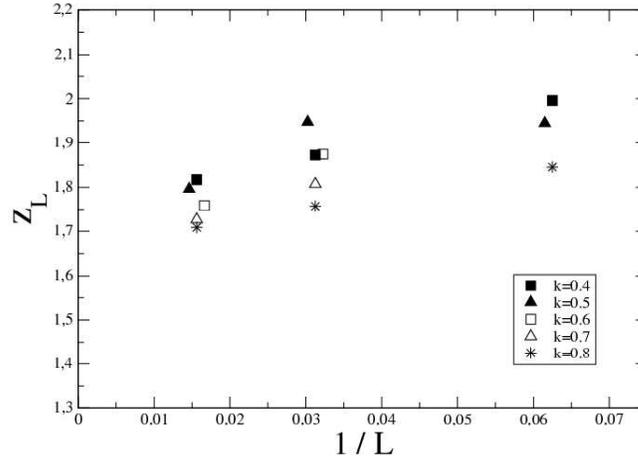


Figura 4.3: Efeitos sobre os expoentes dinâmicos efetivos z_L devido a mudanças na constante k para o modelo RSOS em $d = 3$. Os pontos referentes a $k = 0.5$ e $k = 0.6$ foram deslocados de 0.001 no eixo das abscissas.

Tendo em vista esta discussão, na figura 4.4 mostramos $z_L \times 1/L$ para os dois modelos discretos, para $L \geq 32$ (tamanhos de rede mais relevantes), com $k = 0.7$ e $k = 0.8$. Os pontos indicam uma convergência para $z \approx 1.7$, em concordância com a relação 3.35 e sugerindo que, se o resultado de Lässig for correto (equação 4.1), devemos ter $k_0 = 5$.

Finalmente, passemos à discussão da possibilidade da universalidade dos valores S e Q para modelos KPZ em $d = 3$.

Primeiramente vejamos os resultados para o coeficiente de assimetria S . Calculamos valores efetivos S_L , definidos como

$$S_L = \frac{w_3(L)}{w_2^{3/2}(L)}, \quad (4.14)$$

para os modelos de *etching* e RSOS. Para estes modelos, $|S_L|$ aumenta com L , o

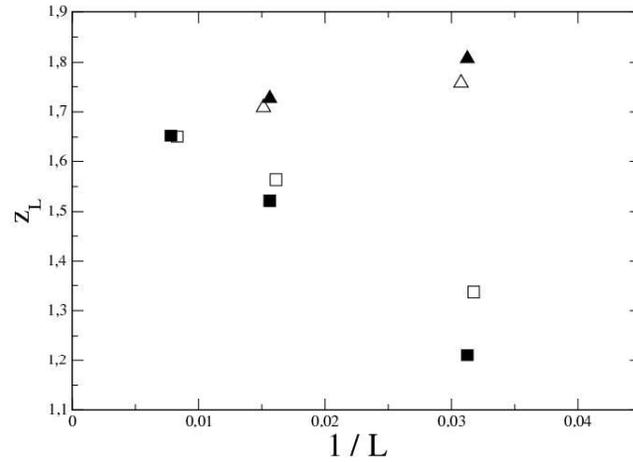


Figura 4.4: Expoentes dinâmicos efetivos z_L para os modelos de *etching* (quadrados cheios representam $k = 0.7$, e vazios, $k = 0.8$) e RSOS (triângulos cheios para $k = 0.7$ e vazios para $k = 0.8$) em $d = 3$. Os pontos referentes a $k = 0.8$ foram deslocados de 0.0005 no eixo das abscissas.

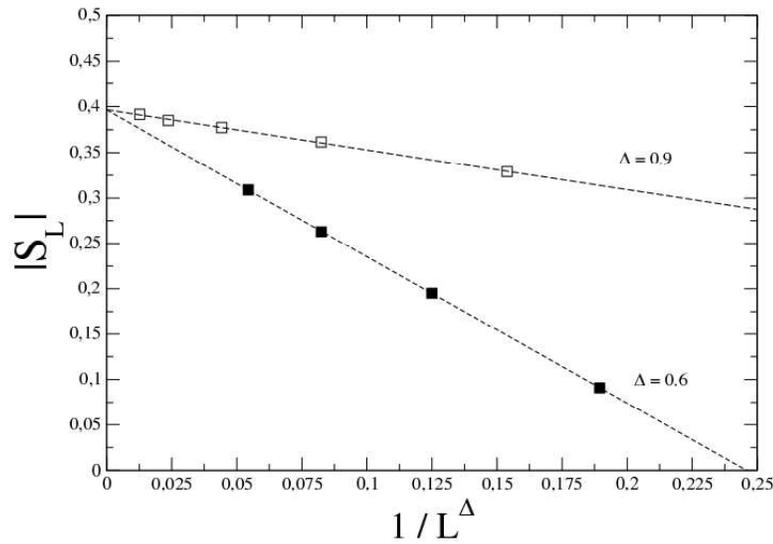


Figura 4.5: Valores efetivos S_L do coeficiente de assimetria para os modelos de *etching* (representados por quadrados cheios) e RSOS (vazios) em $d = 3$. As retas indicam os melhores ajustes lineares para os dois modelos.

que nos leva a propor uma correção de escala do tipo $|S_L| \approx |S| + BL^{-\Delta}$ para extrapolarmos nossos dados, onde Δ é um expoente de correção de escala, determinado por ajustes lineares em gráficos de $|S_L| \times L^{-\Delta}$, e B é constante. Na figura 4.5 mostramos o melhor ajuste dos dados para os modelos de *etching* e RSOS, o que acontece com $\Delta = 0.6$ e $\Delta = 0.9$, respectivamente. Foram considerados os pontos correspondentes a $L \geq 16$ para o modelo de *etching* e $L \geq 8$ para o RSOS. Podemos notar a convergência clara para um mesmo valor assintótico $|S| \approx 0.39$.

Utilizamos um procedimento semelhante em busca de um valor assintótico Q para a curtose. Considerando a equação 4.4, obtivemos valores efetivos Q_L :

$$Q_L \equiv \frac{w_4(L)}{w_2^2(L)} - 3. \quad (4.15)$$

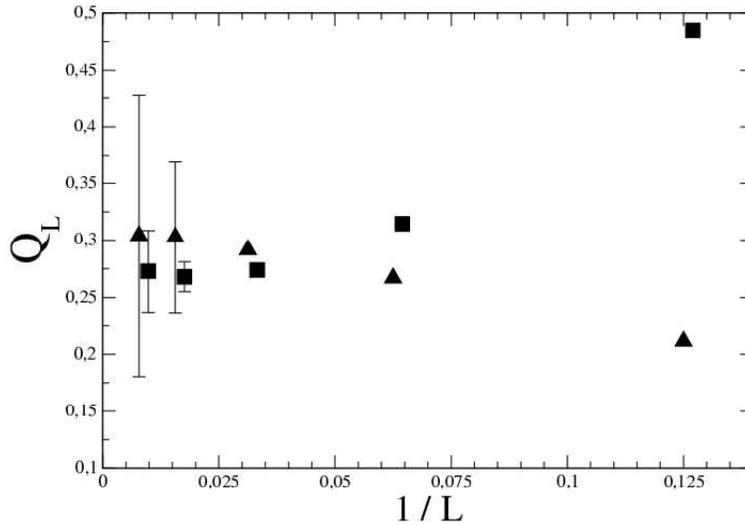


Figura 4.6: Valores efetivos Q_L da curtose para os modelos de *etching* (representados por quadrados e deslocados de 0.002 no eixo das abscissas) e RSOS (triângulos) em $d = 3$.

Na figura 4.6 mostramos $Q_L \times 1/L$, com $L \geq 8$ para ambos os modelos. Visto que Q_L varia pouco com L nos tamanhos maiores, não há necessidade de ajustarmos os dados incluindo correções de tamanho finito. Observe que os pontos convergem para um valor entre $Q = 0.25$ e $Q = 0.3$.

Considerando nossos resultados, temos evidências da universalidade do coeficiente de assimetria (em módulo, $|S|$) e da curtose (Q) para modelos KPZ, com $|S| \approx 0.39$ e $0.25 \leq Q \leq 0.3$. Isso sugere a universalidade das distribuições de altura para diferentes modelos KPZ nesta dimensão.

4.5 Modelos KPZ em $d = 4$ - Resultados Obtidos

Para $d = 4$, os mesmos modelos discretos da seção anterior foram utilizados. O modelo de *etching* foi simulado em redes de comprimento $L = 2^n$, com n inteiro variando de $n = 2$ ($L = 4$) a $n = 6$ ($L = 64$), até o regime de saturação da largura de interface, de forma análoga à feita em $d = 3$. Para o tamanho de rede $L = 4$, 10^5 depósitos foram crescidos. Para $L = 8$ e $L = 16$, simulamos cerca de 10^4 depósitos. Para $L = 32$ e $L = 64$ geramos 2.6×10^3 e 53 depósitos, respectivamente. O modelo RSOS foi simulado para os mesmos tamanhos de rede que o modelo de *etching*. Foram gerados da ordem de 10^4 depósitos para os menores tamanhos ($L \leq 16$), 160 depósitos para $L = 32$ e 31 depósitos para $L = 64$. O tempo necessário para a simulação desses modelos foi grande: para o maior tamanho de rede, eram necessários cerca de três dias de simulação para o modelo de *etching* e pouco mais de quatro dias para o RSOS, para a geração de um dado depósito em um processador de 1.53 MHz.

Para o modelo RSOS, devido às barras de erro expressivas nos valores efetivos α_L , z_L e Q_L para $L = 64$, os desconsideramos em nossas análises. Porém, este tamanho de rede será levado em conta na estimativa do coeficiente de assimetria e nos testes de relação de escala logarítmica para a rugosidade.

Nesta seção, temos dois pontos básicos para discussão: a questão da universalidade do coeficiente de assimetria e da curtose em $d = 4$ e o problema da dimensão crítica superior para a equação KPZ.

Começaremos pela análise do coeficiente de assimetria S . A figura 4.7 mostra os valores efetivos $|S_L|$ calculados para os dois modelos. Analogamente ao problema em $d = 3$, $|S_L|$ aumenta com L , de modo que consideramos uma correção de escala do mesmo tipo: $|S_L| \approx |S| + BL^{-\Delta}$, onde Δ é determinado por ajustes lineares num gráfico do tipo 4.7 e B é constante. Foram considerados todos os pontos relativos ao

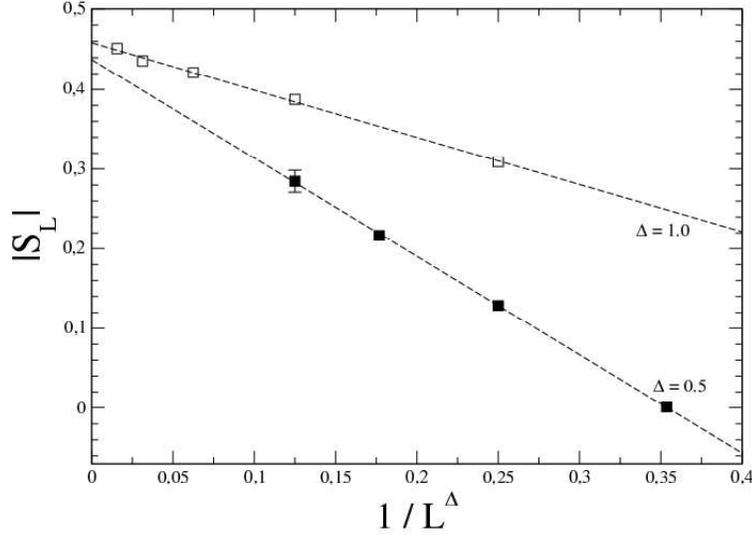


Figura 4.7: Valores efetivos S_L do coeficiente de assimetria para os modelos de *etching* (representados por quadrados cheios) e RSOS (vazios) em $d = 4$. As retas indicam os melhores ajustes lineares para os dois modelos.

modelo RSOS e os pontos correspondentes a $L \geq 8$ para o modelo de *etching*. Na figura é indicado o melhor ajuste linear para os dois modelos. Os valores do expoente de correção de escala Δ correspondentes são $\Delta = 0.5$ (*etching*) e $\Delta = 1.0$ (RSOS). Note que os ajustes convergem para valores bem próximos quando $L \rightarrow \infty$, em torno de $S \approx 0.45$.

No que tange a curtose, não consideramos nenhum tipo de correção de tamanho finito, a exemplo dos resultados em $d = 3$, conforme é mostrado na figura 4.8. Apesar de barras de erro um pouco expressivas para os últimos pontos ($L \geq 64$), observamos evidências de convergência para um valor assintótico em torno de $Q \approx 0.4$, de modo que nossos resultados, tanto em $d = 3$ como em $d = 4$, corroboram a idéia de que a universalidade das distribuições de alturas é extensiva a dimensões maiores que $d = 2$.

Chegamos à questão da dimensão crítica superior para a equação KPZ. Comentamos anteriormente (seção 4.3) que, no caso de $d_c = 4$, devemos ter comportamento

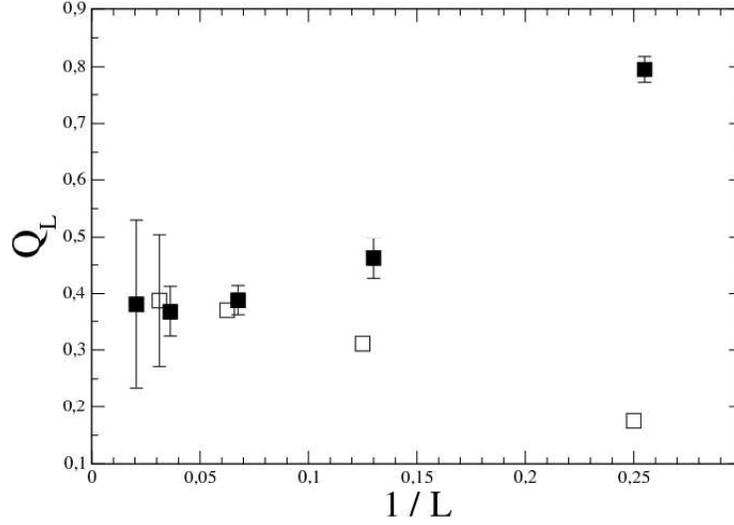


Figura 4.8: Valores efetivos Q_L da curvose para os modelos de *etching* (representados por quadrados cheios e deslocados de 0.005 no eixo das abscissas) e RSOS (quadrados vazios) em $d = 4$.

logarítmico da rugosidade com o tamanho de rede L , no regime de saturação, a partir desta dimensão. Vamos portanto testar tal hipótese considerando tanto $w_{2_{sat}}$ como w_{sat} .

Comparando dois tamanhos de rede admitindo rugosidade quadrada logarítmica, temos:

$$\begin{cases} w_{2_{sat}}(L) &= A \ln L + B \\ w_{2_{sat}}(L/2) &= A \ln(L/2) + B \end{cases} \Rightarrow \Delta w_{2_{sat}} = w_{2_{sat}}(L) - w_{2_{sat}}(L/2) = A \ln 2 = \text{cte}, \quad (4.16)$$

onde A e B são constantes. Ou seja, deveríamos obter um valor constante ao subtrairmos as quantidades $w_{2_{sat}}$ para tamanhos de rede L e $L/2$.

Na figura 4.9a mostramos os valores $\Delta w_{2_{sat}}$, para o modelo de *etching*, para cada dois tamanhos de rede consecutivos, o mesmo sendo mostrado na figura 4.9b para o modelo RSOS. Há uma divergência dos valores calculados na medida em que L aumenta, o que aponta no sentido de que a rugosidade quadrada $w_{2_{sat}}$ não escala logaritmicamente

com o tamanho de rede. Nas figuras 4.9a e 4.9b, consideramos uma correção de escala do tipo $1/L$. Tentativas de correção do tipo $1/L^\Delta$, com Δ entre 0.5 e 1, e do tipo $1/\ln L$ também nos levam a conclusões semelhantes.

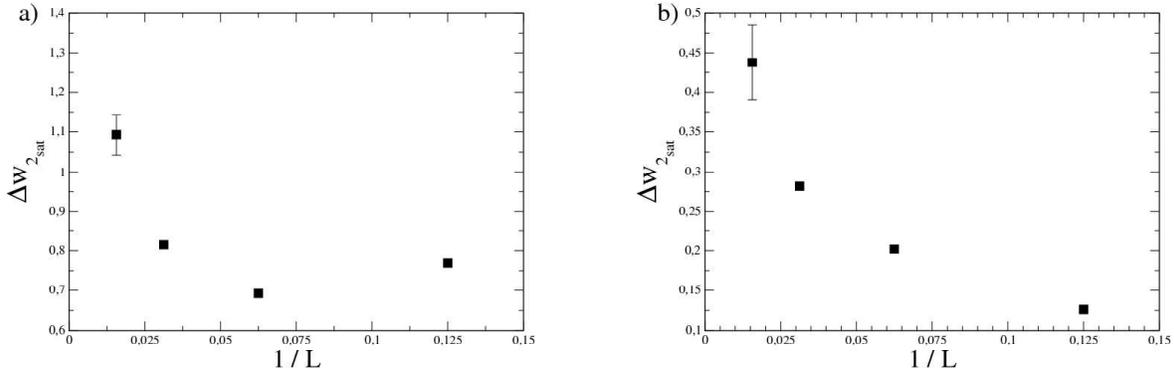


Figura 4.9: Teste para relação de escala $w_{2sat} \sim \ln L$ para a) modelo de *etching* e b) modelo RSOS, em $d = 4$.

O segundo teste corresponde ao caso de a hipótese logarítmica ser verdadeira para a largura de interface w_{sat} , o que equivale a testar a relação $w_{2sat} \sim \ln^2 L$ (onde a rugosidade quadrada escalaria com o logaritmo quadrado de L). Isso nos leva a:

$$\begin{cases} w_{sat}(L) &= C \ln L + D \\ w_{sat}(L/2) &= C \ln(L/2) + D \end{cases} \Rightarrow \Delta w_{sat} = w_{sat}(L) - w_{sat}(L/2) = C \ln 2 = \text{cte}, \quad (4.17)$$

com C e D constantes, de modo que chegamos a uma condição análoga ao problema anterior. Nas figuras 4.10a e 4.10b temos $\Delta w_{sat} \times 1/L$ para os modelos de *etching* e RSOS, respectivamente. Os pontos não assumem um valor constante, indicando uma divergência conforme se aumenta o tamanho de rede. O mesmo ocorre com correções do tipo $1/L^\Delta$, com $0.5 \leq \Delta \leq 1$, e $1/\ln L$. Assim, a rugosidade nesta dimensão não deve ser logarítmica, a exemplo de w_{2sat} .

Embora os testes acima nos forneçam indícios de que a dimensão crítica superior não seja $d_c = 4$, buscamos outros meios de avaliar o problema, um dos quais consiste na estimativa dos expoentes de escala. Vejamos os resultados para o expoente de rugosidade α .

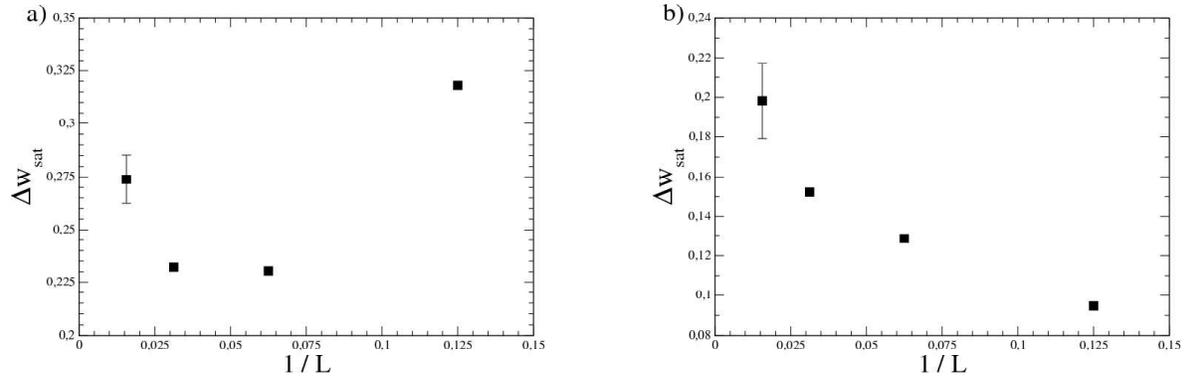


Figura 4.10: Teste para relação de escala $w_{2_{sat}} \sim \ln^2 L$ para a) modelo de *etching* e b) modelo RSOS, em $d = 4$.

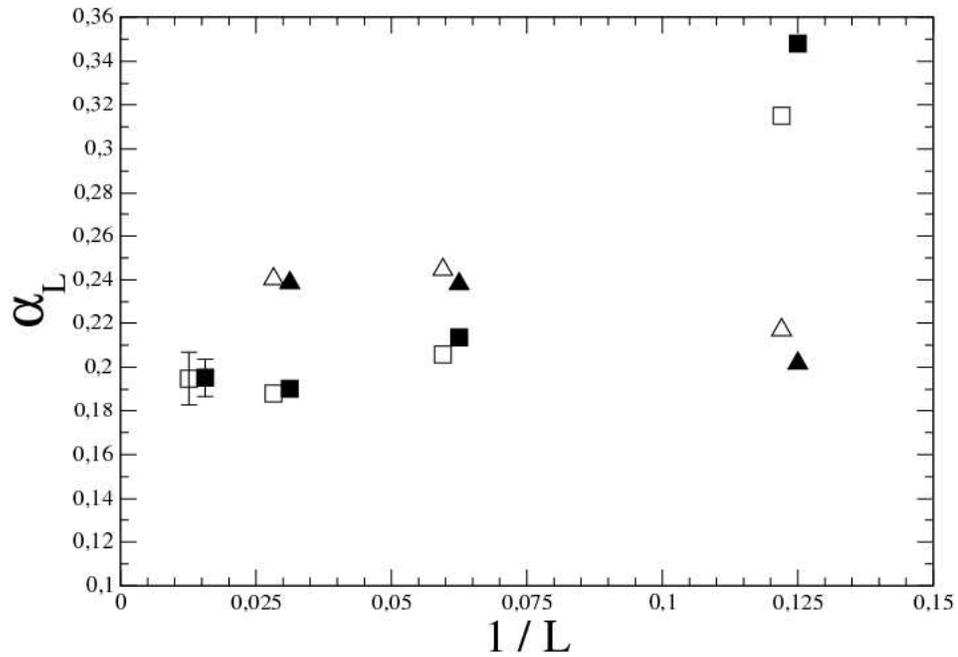


Figura 4.11: Expoentes de rugosidade efetivos $\alpha_L^{(2)}$ (representados por quadrados e triângulos cheios para os modelos de *etching* e RSOS, respectivamente) e $\alpha_L^{(4)}$ (quadrados e triângulos vazios) em $d = 4$. Os expoentes $\alpha_L^{(4)}$ foram deslocados de 0.003 no eixo das abscissas.

Os expoentes efetivos obtidos $\alpha_L^{(2)}$ e $\alpha_L^{(4)}$ (desenvolvimento análogo ao feito na seção 4.4) são mostrados na figura 4.11. Embora as simulações até os tamanhos de rede trabalhados não nos permitam apontar um valor assintótico α confiável, observamos que nossos dados são compatíveis com α na faixa de 0.19 a 0.25.

Comparando tais resultados com o trabalho de Lässig [37], dos valores apontados como possíveis (veja a equação 4.1), haveria acordo apenas para $k_0 = 7$, que leva a $\alpha \approx 0.222$, ficando descartados $k_0 = 5$, correspondente a $\alpha \approx 0.286$, e $k_0 = 9$ ($\alpha \approx 0.182$). No entanto, note que as correções de tamanho finito para o modelo de *etching* são fortes (a exemplo das observações em $d = 3$), e que os dados relativos ao modelo RSOS sistematicamente sugerem α acima do valor proposto por Lässig, em concordância com Marinari et al. [39].

Estimamos também o expoente dinâmico z por meio de extrapolações de expoentes efetivos, seguindo o raciocínio da seção anterior que culminou na equação 4.13. O comportamento dos expoentes efetivos com o tamanho de rede é mostrado na figura 4.12 para $k = 0.7$ e $k = 0.8$.

Cabe comentarmos mais detalhadamente as indicações deste gráfico para os dois modelos. Embora pareça haver uma divergência de z_L com o aumento de L para o modelo de *etching*, é possível que os pontos que correspondem a tamanhos $L \leq 16$ ($\tau_0 \sim 1$) tenham sido obtidos partindo de tempos que ainda não tenham iniciado o processo de saturação, de modo a não terem tanta relevância se comparados aos dois últimos pontos ($L > 16$, cujos tempos τ_0 são da ordem de 10).

O modelo RSOS, embora seja computacionalmente mais dispendioso que o modelo de *etching*, apresenta tempos de *crossover* um pouco maiores que os deste último. Para $k = 0.7$ temos $\tau_0 \sim 1$ para o menor tamanho, $\tau_0 \sim 10$ para $L = 8$ e $L = 16$ e $\tau_0 \sim 10^2$ para $L = 32$; para $k = 0.8$, $\tau_0 \sim 10^2$ para $L \geq 16$ e $\tau_0 \sim 10$ para $L < 16$.

No gráfico, os dois últimos pontos relativos ao modelo RSOS sugerem z em torno de 1.8. Embora os pontos correspondentes ao modelo de *etching* não pareçam convergir até $L = 64$, notamos que o último ponto (maior tamanho de rede) indica $z_L \approx 1.7$, de modo que se aproxima da mesma região apontada pelos valores RSOS, o que nos leva a crer que a convergência para aquele modelo se torne mais clara a partir daí.

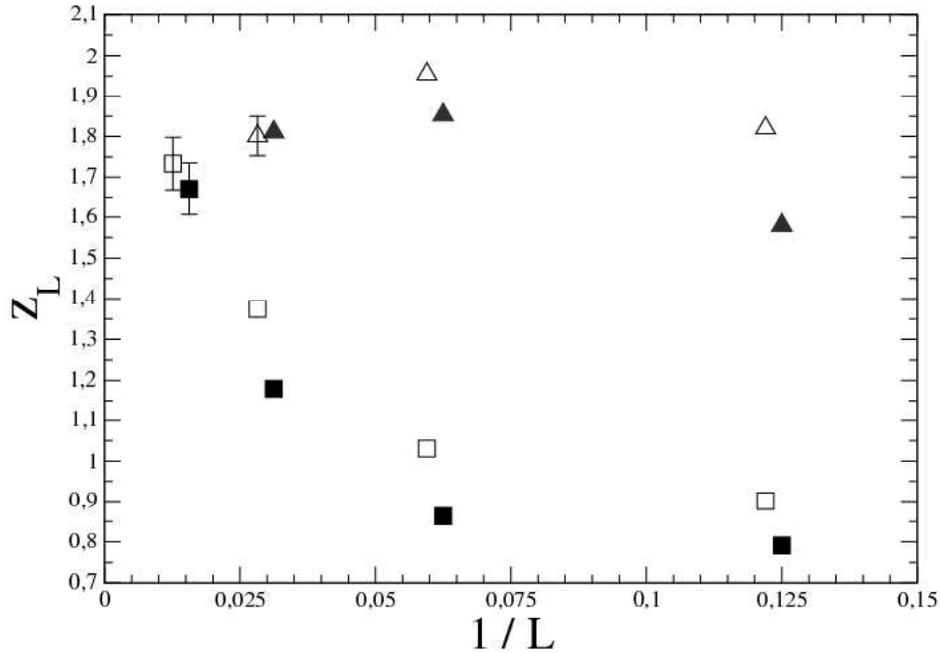


Figura 4.12: Expoentes dinâmicos efetivos z_L para os modelos de *etching* (quadrados cheios representam $k = 0.7$, e vazios, $k = 0.8$) e RSOS (triângulos vazios para $k = 0.7$ e cheios para $k = 0.8$) em $d = 4$. Os pontos representados por quadrados e triângulos vazios foram deslocados de 0.003 no eixo das abscissas.

Se combinados os resultados para os expoentes α e z , temos nova indicação de que a dimensão crítica superior para a equação KPZ não é $d_c = 4$, já que $\alpha > 0$ e $z < 2$, diferentemente do que teríamos no caso de uma suposta relação de escala logarítmica entre a rugosidade e o tamanho de rede.

Consideramos ainda mais um teste, uma condição que nos permitiria estimar z supondo um comportamento de escala logarítmico para a rugosidade. No caso de $d = 4$ ser a dimensão crítica superior para a equação KPZ, seria esperado que os modelos de *etching* e RSOS obedecessem a relação de escala dinâmica

$$w_2 = A \ln [LG(t/\tau)], \quad (4.18)$$

onde G é uma função de escala e A é uma constante, e, no limite $x \rightarrow \infty$, espera-se que $G(x) \rightarrow a$, com a constante. Dessa forma, o tempo característico τ_0 definido a partir

da equação 4.12 não é mais proporcional a τ . A fim de definir um tempo característico τ_1 que seja proporcional a τ neste sistema, consideramos

$$\delta w_2 \equiv w_{2_{sat}} - w_2(\tau_1) = C, \quad (4.19)$$

com C constante. Desta condição, chegamos a

$$G\left(\frac{\tau_1}{\tau}\right) = \text{cte}, \quad \forall L, \quad (4.20)$$

sendo estabelecida a proporcionalidade entre τ_1 e τ .

Os tempos característicos foram obtidos da equação 4.19 com $C = 0.1$ para os dois modelos. Os expoentes efetivos z_L são obtidos de (veja relação 4.10):

$$z_L = \frac{\ln[\tau_1(L)/\tau_1(L/2)]}{\ln 2}. \quad (4.21)$$

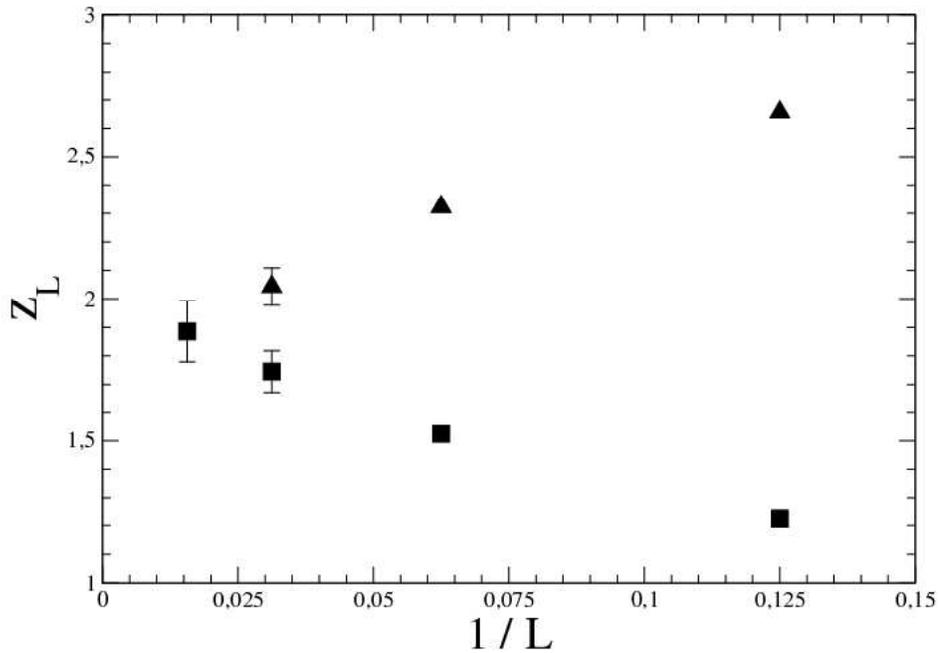


Figura 4.13: Expoentes dinâmicos efetivos z_L para os modelos de *etching* (representados por quadrados) e RSOS (triângulos), com $C = 0.1$, em $d = 4$.

Na figura 4.13 mostramos $z_L \times 1/L$ para os modelos de *etching* e RSOS (onde foi desconsiderado o ponto correspondente ao tamanho de rede $L = 64$ para este último modelo). A princípio nos parece haver uma discordância em relação aos testes anteriores desta seção, na medida em que há indicações de uma possível convergência para o expoente assintótico $z = 2$, o que iria a favor de $d_c = 4$. Contudo, devemos analisar com mais cuidado este resultado.

Note que, utilizando a condição 4.19 para um modelo que obedeça a relação de escala FV (veja a equação 2.10),

$$w_2(L, t) \approx L^{2\alpha} g\left(\frac{t}{\tau}\right), \quad (4.22)$$

chegaríamos a uma condição do tipo

$$g\left(\frac{\tau_1}{\tau}\right) = a - \frac{b}{L^{2\alpha}}, \quad (4.23)$$

com a e b constantes. Assim, a proporcionalidade entre τ_1 e τ seria obtida no limite $L \rightarrow \infty$ com correções possivelmente fortes.

Para apontarmos como tal desproporcionalidade entre os tempos característicos afetaria os expoentes efetivos z_L obtidos da equação 4.21, deveríamos conhecer a forma da função $g(t/\tau)$ (equação 4.22) para tempos t intermediários (pouco antes da saturação da superfície), que, aplicada à condição 4.19, nos daria uma relação direta entre os tempos τ_1 e τ . Daí, substituindo esta relação na fórmula 4.21 para expoentes efetivos z_L , poderíamos avaliar os efeitos do tempo τ_1 (desproporcional a τ) sobre esses expoentes.

Reis, trabalhando com alguns modelos KPZ em $d = 1$ e $d = 2$ [52], obteve que a função de escala da equação FV (2.10), ao se aproximar da região de estado estacionário, obedece um decaimento exponencial do tipo

$$f\left(\frac{t}{\tau}\right) = c - d \exp\left(\frac{-t}{\tau}\right), \quad (4.24)$$

com c e d constantes. Admitindo que $g(t/\tau)$ na equação 4.22 se comporte de modo semelhante e substituindo tal comportamento na relação 4.19, teríamos que

$$\tau_1 \sim \tau \ln(L). \quad (4.25)$$

Isto significa que τ_1 e τ escalam com L com a mesma lei de potência, porém com uma correção logarítmica (que não altera a lei de potência assintótica). Substituindo

a expressão acima na equação 4.21, surgiria um fator multiplicativo logarítmico em L que tende a aumentar os valores z_L , mas esta correção diminuiria com o aumento de L e z_L acabaria convergindo para o valor assintótico real z . Porém, esta convergência é lenta e, para os tamanhos de rede trabalhados, esperamos obter expoentes z_L maiores do que de fato o seriam se os tempos τ_1 e τ fossem proporcionais.

Visto que anteriormente obtivemos valores $\alpha > 0$, e que $\Delta w_{2_{sat}}$ para os diferentes L descartam a relação de escala logarítmica para w_2 , temos evidências de que a análise do expoente dinâmico z por este último método possa estar “mascarada” pelo fator multiplicativo mencionado, de modo que este teste não é adequado neste caso.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho estudamos dois modelos de crescimento discretos reconhecidamente pertencentes à classe de universalidade KPZ: o modelo de *etching* e o modelo RSOS. Ambos foram simulados em dimensões $d = 3$ e $d = 4$.

A partir de nossas simulações em $d = 3$, obtivemos os valores $|S| = 0.39 \pm 0.02$ para o coeficiente de assimetria e $0.25 \leq Q \leq 0.3$ para a curtose, para ambos os modelos. Isto sugere que as distribuições de alturas na classe KPZ são universais nesta dimensão. Além disso, foram obtidas estimativas para o expoente de rugosidade $0.26 \leq \alpha \leq 0.315$ e para o expoente dinâmico $z \approx 1.7$. Uma comparação com a condição de quantização 4.1 proposta por Lässig [37] nos levaria ao valor $\alpha = 2/7 \approx 0.286$ como o único possível para o expoente de rugosidade. No entanto, cabe lembrar que o modelo com correções de tamanho finito menores (RSOS) sistematicamente sugere α acima deste valor, em concordância com Marinari et al. [39].

A obtenção dos valores $|S| = 0.45 \pm 0.03$ e $Q \approx 0.4$ para o coeficiente de assimetria e para a curtose, em $d = 4$, também evidencia a universalidade das distribuições de alturas, e, juntamente com os resultados em $d = 3$, contribui no sentido de que tal propriedade é extensiva a dimensões $d \geq 2$.

No que se refere à questão da existência da dimensão crítica superior, nossos dados descartam $d_c = 4$, na medida em que simulações nesta dimensão, além de excluir uma possível relação de escala logarítmica entre a rugosidade e o tamanho de rede, nos levam ao expoente de rugosidade α na faixa de 0.19 a 0.25 (diferentemente de $\alpha = 0$,

o que aconteceria se $d_c = 4$). Em relação às estimativas para o expoente dinâmico z , partindo-se de considerações nas quais os modelos obedeceriam a relação de escala FV obtemos $z < 2$. Considerando que os modelos tenham relação de escala logarítmica, obtemos $z \approx 2$, mas, conforme observado no capítulo anterior, há evidências de que este último valor esteja superestimado.

Como perspectiva de continuação deste trabalho, poderíamos estender nosso estudo das propriedades de escala de interfaces KPZ em dimensões $d = 3$ e $d = 4$ analisando suas distribuições de largura de interface no estado estacionário. Note que, enquanto as distribuições de altura representam flutuações espaciais e configuracionais das alturas, a largura de interface é uma quantidade global (média espacial) cuja distribuição para diferentes configurações seria analisada. Em $d = 2$, já foi observado que as distribuições de largura de diferentes modelos na classe KPZ apresentam uma forma universal [54].

Referências Bibliográficas

- [1] Ala-Nissila, T., Hjelt, T. et al. *J. Stat. Phys.* **72**, 207 (1993).
- [2] Amar, J. G. e Family, F. *Phys. Rev. A* **41**, 3399 (1990).
- [3] Barabási, A. -L. e Stanley, H. E. *Fractal Concepts in Surface Growth*, New York, Cambridge Univ. Press, 1995.
- [4] Ballestad, A., Ruck, B. J. et al. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2377 (2001).
- [5] Bathomarco R. V., Solorzano G. et al. *Appl. Surf. Sci.* **233**, 29 (2004).
- [6] Beccaria, M. e Curci, G. *Phys. Rev. E* **50**, 4560 (1994).
- [7] Chame, A. e Reis, F. D. A. A. *Surf. Sci.* **553**, 145 (2004).
- [8] Chin, C. -S. e den Nijs, M. *Phys. Rev. E* **59**, 2633 (1999).
- [9] Colaioni, F. e Moore, M. A. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3946 (2001).
- [10] Costa. B. S., Euzébio, J. A. R. e Aarão Reis, F. D. A. *Physica A* **328**, 193 (2003).
- [11] Craus, C. B., Palasantzas, G. et al. *J. Appl. Phys.* **97**, 013904 (2005).
- [12] Das Sarma, S. e Tamborenea, P. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 325 (1991).
- [13] Devillard, P. e Stanley, H. E. *Physica A* **160**, 298 (1989).
- [14] D'Souza, R. M., *Int. J. Mod. Phys. C* **8**, 941 (1997).
- [15] Dotto, M. E. R. e Kleinke, M. U. *Phys. Rev. B* **65**, 245323 (2002).
- [16] Edwards, S. F. e Wilkinson, D. R. *Proc. R. Soc. London A* **381**, L17 (1982).

- [17] Family, F. e Vicsek, T. *J. Phys. A* **18**, L75 (1985).
- [18] Family, F. *J. Phys. A* **19**, L441 (1986).
- [19] Family, F. e Vicsek, T., eds. *Dynamics of Fractal Surfaces*, Singapore, World Scientific, 1991.
- [20] Feder, J. *Fractals*, New York, Plenum Press, 1988.
- [21] Forrest, B. M. e Tang, L. *J. Stat. Phys.* **60**, 181 (1990).
- [22] Forster, D., Nelson, D. R. e Stephen, M. J. *Phys. Rev. A* **16**, 732 (1977).
- [23] Giada, L., Giacometti, A. e Rossi, M. *Phys. Rev. E* **65**, 036134 (2002).
- [24] Goswami, D. K. e Dev, B. N. *Nucl. Instr. & Meth. in Phys. Res. B* **212**, 253 (2003).
- [25] Habenicht, S., Lieb, K. P. et al. *Nucl. Instr. & Meth. in Phys. Res. B* **161**, 958 (2000).
- [26] Halpin-Healy, T., Zhang, Y. -C. *Phys. Rep.* **254**, 215 (1995).
- [27] Huo, S. e Schwarzacher, W. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 256 (2001).
- [28] Hur, T. B., Hwang, Y. H. et al. *J. Appl. Phys.* **96**, 1740 (2004).
- [29] Jullien, R. e Botet, R. *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2055 (1985).
- [30] Kardar, M., Parisi, G. e Zhang, Y. -C. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
- [31] Kertész, J. e Wolf, D. E. *J. Phys. A* **21**, 747 (1988).
- [32] Kim, J. M. e Kosterlitz, J. M. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2289 (1989).
- [33] Krug, J. e Meakin, P. *J. Phys. A* **23**, L987 (1990).
- [34] Krug, J., Meakin, P. e Halpin-Healy, T. *Phys. Rev. A* **45**, 638 (1992).
- [35] Krug, J. *Adv. Phys.* **46**, 139 (1997).
- [36] Lässig, M. e Kinzelbach, H. *Phys. Rev. Lett* **78**, 903 (1997).

- [37] Lässig, M. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2366 (1998).
- [38] Liu, D. e Plischke, M. *Phys. Rev. B* **38**, 4781 (1988).
- [39] Marinari, E., Pagnani, A. e Parisi, G. *J. Phys. A* **33**, 8181 (2000).
- [40] Marinari, E., Pagnani, A. et al. *Phys. Rev. E* **65**, 026136 (2002).
- [41] Maunuksela, J., Myllys, M. et al. *Europ. Phys. J. B* **33**, 193 (2003).
- [42] Meakin, P., Ramanlal, P. et al. *Phys. Rev. A.* **34**, 5091 (1986).
- [43] Meakin, P. *Phys. Rep.* **235**, 189 (1993).
- [44] Medina, E., Hwa, T. et al. *Phys. Rev. A* **39**, 3053 (1989).
- [45] Mello, B. A., Chaves, A. S. e Oliveira, F. A. *Phys. Rev. E* **63**, 41113 (2001).
- [46] Mello, L. L., Salvadori, M. C. e Cattani, M. *Surf. Rev. Lett.* **10**, 903 (2003).
- [47] Moro, E. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 238303 (2001).
- [48] Moser, K., Kertész J. e Wolf, D. E. *Physica A* **178**, 215 (1991).
- [49] Nattermann, T. e Tang, L. -H. *Phys. Rev. A* **45**, 7156 (1992).
- [50] Neyman, J. ed. *Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Volume IV: Biology and Problems of Health*, Berkeley, University of California Press, 1961.
- [51] Reis, F. D. A. A. *Phys. Rev. E* **63**, 056116 (2001).
- [52] Reis, F. D. A. A. *Physica A* **316**, 250 (2002).
- [53] Reis, F. D. A. A. *Phys. Rev. E* **69**, 021610 (2004).
- [54] Reis, F. D. A. A. *Phys. Rev. E*, submetido.
- [55] Salvadori, M. C., Mello, L. L. et al. *Surf. Rev. Lett.* **9**, 1409 (2002).
- [56] Schilard, P. L., Azzaroni, O. et al. *Phys. Rev. B* **59**, 4638 (1999).
- [57] Shim, Y. e Landau, D. P. *Phys. Rev. E* **64**, 036110 (2001).

- [58] Vicsek, T. *Fractal Growth Phenomena*, Singapore, World Scientific, 1989.
- [59] Vicsek, T., Shlesinger, M. e Matsushita, M., eds. *Fractals in Natural Sciences*, Singapore, World Scientific, 1994.
- [60] Vold, M. J. *J. Coll. Sci.* **14**, 168 (1959).
- [61] Vold, M. J. *J. Phys. Chem.* **63**, 1608 (1959).
- [62] Wang, X., Zheng, W. T. et al. *J. Vacc. Sci. & Tech. A* **21**, 983 (2003).
- [63] Wolf, D. E. e Kertész, J. *Europhys. Lett* **4**, 651 (1987).
- [64] Wolf, D. E. e Villain, J. *Europhys. Lett.* **13**, 389 (1990).