



INSTITUTO DE FÍSICA

Universidade Federal Fluminense

**CARACTERIZAÇÃO DA DEPOSIÇÃO
BALÍSTICA BI-DISPERSA EM 2 E 3
DIMENSÕES**

Flávio Alexandre da Silveira
fsilveira@if.uff.br

Orientador: Fábio David Alves Araújo Reis
reis@if.uff.br

CARACTERIZAÇÃO DA DEPOSIÇÃO BALÍSTICA BI-DISPERSA EM 2 E 3 DIMENSÕES

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

Niterói, junho de 2007

Não falta mesmo quem sustente que Deus, antes de se pôr a amassar o barro com que depois os fabricou, começou a desenhar com um pau de giz o homem e a mulher na superfície da primeira noite, daí é que nos veio a única certeza que temos, a de que fomos, somos e seremos pó, e que em uma noite tão profunda como aquela nos perderemos.

José Saramago

Agradecimentos

Aos meus pais, Leila e Flávio, por sempre tornarem fáceis as coisas difíceis, e difíceis as fáceis, me ensinando, desde muito pequeno, conceitos caros ao exercício do raciocínio físico, como *contradição* e *paradoxo*.

Ao meu irmão, Felipe, pelas intermináveis discussões sobre Física, que tanto contribuíram para meu interesse em aprender cada dia mais, só para discutir com ele. Ele detesta Física.

Ao Fábio, que me orienta desde o início do curso de graduação. Sua dedicação comigo não tem paralelo, e sua paciência só se compara talvez à do meu irmão. Durante todo este tempo em que trabalhamos juntos, o Clube de Regatas do Flamengo foi tri-campeão (1999–2001) e campeão estadual (2004 e 2007), campeão da Taça Guanabara três vezes (2001, 2004 e 2007), campeão da Taça Rio (2000), campeão da Copa dos Campeões (2001) e, finalmente, bi-campeão da Copa do Brasil (2006). O Fábio, como todas as pessoas de caráter firme que conheço, é rubro-negro e não desiste nunca.

A todos os amigos de mesa e de bar, que me apoiaram em algumas derrotas do Flamengo, e comemoraram comigo algumas vitórias (alguns têm a grave falha de caráter de não serem rubro-negros, e até pior). Mesas de bar do Rio e de Niterói contribuíram de maneira definitiva para a elucidação de inconsistências e contradições neste trabalho (e peço desculpas se alguma resiste inconsistente e contraditória).

Ao pessoal da Secretaria de Pós-Graduação e da Biblioteca do Instituto de Física da UFF, Ana Maria, Lúcia, João “John Boy” e Luana, e todos os outros que não citei aqui, pela tolerância e paciência com todos os livros devolvidos em atraso, e por inscrições-relâmpago.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro.

Por fim, mas não por último, à minha namorada, Natalia, inteligente e maravilhosa, sem a qual eu não seria nada. Ela sempre me conforta e me consola, nunca se queixa ou interfere, não pergunta nada e apóia tudo, e escreve as minhas dedicatórias¹.

¹Tomei a liberdade de emprestar esta parte da dedicatória de Malvino, A. P.: *Eletrônica* vol. 1, McGraw-Hill (1984), por ser muito apropriada.

Resumo

Analisamos o modelo de deposição balística bidispersa (DBB), no qual competem a deposição de partículas de dois tamanhos diferentes, que respondem por uma componente aleatória e outra correlacionada. A agregação de dímeros (partículas maiores) provoca crescimento lateral, que tipicamente caracteriza sistemas na classe KPZ, enquanto a agregação de monômeros (ou simplesmente partículas) se dá de acordo com as regras da deposição aleatória. Argumentamos que o modelo DBB exibe o mesmo comportamento de escala observado em outros modelos competitivos que envolvem a deposição aleatória e uma componente correlacionada. Em duas e três dimensões, estudamos as relações entre o parâmetro F , relacionado à proporção entre os dois tipos de grãos, o tempo característico do crossover do regime de crescimento aleatório para o regime correlacionado (aplicando argumentos de escala à largura de interface, nos diferentes regimes de crescimento), e os coeficientes da equação estocástica associada ao modelo. As conclusões são amparadas por resultados de simulações numéricas em $d = 1 + 1$ e $d = 2 + 1$ dimensões. As distribuições de rugosidade estacionária são usadas na discussão da classe de universalidade destes modelos. Neste trabalho, também estudamos as propriedades geométricas da superfície interna, e a transição de percolação dos depósitos. Observamos que a fase porosa percola mesmo a baixas concentrações de dímeros, em contraste com outros modelos de crescimento capazes de gerar depósitos porosos.

Abstract

We analyze the bi-disperse ballistic deposition model (DBB), in which deposition of two different sizes of particles, accounting for a random and a correlated component, compete. The aggregation of particles of the latter type (bigger grains) causes lateral growth, which typically characterizes Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) growth, while particles of the first type aggregate following the rules of random deposition (DA). We argue that DBB exhibits the same scaling behaviour as other competitive growth models involving DA and some other correlated component. In two and three dimensions, we study the relationship between the parameter F , related to the proportion between the two types of grain, the crossover time from random to correlated growth (applying scaling arguments to the coefficients of surface width, in different growth regimes, as in a previous work), and the coefficients of the stochastic equation of motion. The conclusions are supported by results of numerical simulations in $d = 1 + 1$ and $d = 2 + 1$ dimensions. The steady-state roughness distributions have proved to be very useful in the discussion of the universality class of these deposition models. We also studied the geometric properties of the exposed surface and the percolation transition of the porous deposits. We observe that the porous media percolate even for very small concentrations of the bigger grains, in contrast to related growth models of porous deposits.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Modelos Discretos	2
1.2	Modelos Competitivos	2
1.3	O Modelo DBB	3
2	Modelos de Crescimento Discretos	5
2.1	Deposição Balística (DB)	6
2.2	Scaling	9
2.3	Deposição Aleatória (DA)	11
2.4	Correlações e Regime de Saturação	12
2.5	Análise Numérica	14
2.5.1	Expoente de Crescimento	15
2.5.2	Expoente de Rugosidade	17
2.5.3	Expoente Dinâmico	18
3	Equações de Crescimento	21
3.1	Equação de Crescimento para DA	22
3.2	Desvios do Equilíbrio e Enrugamento	23
3.3	Teoria Linear	26
3.3.1	Solução por Scaling	26
3.4	Deposição Aleatória com Relaxação de Superfície (DAR)	27
3.5	Teoria Não-Linear	28
3.5.1	Invariância Galileana	30
3.5.2	Solução por Scaling	30
3.6	DB e a Equação KPZ	31
3.7	Processo Microscópico e Equação de Crescimento	32
3.7.1	DAR e DB e Equações de Crescimento	33
4	Modelos de Crescimento Competitivos	36
4.1	Competição com Deposição Aleatória	37
4.2	Teoria de Escala	39
4.3	Conexão com a Teoria Contínua (1)	43
4.4	Conexão com a Teoria Contínua (2)	45
4.5	Deposição Balística Bi-dispersa (DBB)	47

5	DBB – Propriedades de Interface	53
5.1	Enrugamento Dinâmico DBB	54
5.1.1	Expoente de Rugosidade	55
5.1.2	Expoente Dinâmico	57
5.2	Amplitudes de Escala	58
5.3	Equação Fenomenológica de Crescimento	61
5.4	Distribuições de Rugosidade	63
6	DBB – Geometria dos Agregados em $d = 3$	66
6.1	Porosidade e Conectividade dos Poros	67
6.2	Geometria da Superfície Interna	69
7	Conclusões	72

Capítulo 1

Introdução

A evolução de superfícies na natureza tem importância em muitas áreas do conhecimento humano [1, 2, 3], mas fenômenos que ocorrem na interface dos materiais são particularmente importantes para a melhor compreensão dos mecanismos fora-do-equilíbrio que operam no crescimento e formação dos sólidos. Algumas das teorias mais úteis conhecidas para entender melhor os processos que ocorrem na superfície dos sólidos envolvem conceitos de Mecânica Estatística [4, 25, 52].

Nesse contexto, modelos atomísticos do tipo gás de rede [4] são muito adequados para descrever a morfologia das interfaces, com a qual estão ulteriormente ligadas propriedades ópticas, térmicas e magnéticas dos sólidos, por exemplo. Os modelos atomísticos permitem entender o papel das interações entre as partículas na escala genericamente denominada *microscópica* para o comportamento do sólido em escalas meso- e macroscópicas, sem no entanto considerar aquelas interações em detalhe.

Embora outros modelos sejam discutidos neste trabalho, seu objeto central é o modelo de deposição balística bidispersa (DBB) [64]. O modelo DBB tem algumas propriedades que o diferenciam dos outros modelos de deposição; em particular, não só as propriedades morfológicas da interface, mas também a geometria da estrutura interna dos agregados gerados por DBB é em vários aspectos bastante similar a alguns sistemas reais, e estimula sua investigação.

1.1 Modelos Discretos

Na formação de um sólido, os processos de superfície em escala microscópica se refletem em uma dinâmica característica das flutuações da altura, à medida que mais partículas são depositadas. As complicadas interações entre partículas no processo de deposição são traduzidas, pela modelagem, em algumas regras simples de transição entre estados de sítios de uma rede. A rede evolui no tempo pela escolha aleatória de um sítio, e pela subsequente mudança do estado do sítio escolhido e seus vizinhos segundo as regras de transição, que equivale à deposição de uma partícula no substrato. O estado da rede é dado pelo campo $\psi(\mathbf{r}, t)$, onde \mathbf{r} indexa os sítios, e t é o tempo. O campo ψ pode denotar a *altura* na posição \mathbf{x} de sítio um substrato, ou a densidade de uma ou mais espécies de partículas em uma posição $\mathbf{r} = \mathbf{x} + \mathbf{h}$ do espaço. As regras são criadas de forma que a dinâmica de $\psi(\mathbf{r}, t)$ seja capaz de reproduzir características globais do processo de deposição, e não necessariamente têm relação com o comportamento das partículas no sistema real, podendo guardar apenas algumas de suas simetrias.

Os primeiros dois capítulos deste trabalho fazem a revisão de três importantes modelos de crescimento de filmes, e do adequado contexto para estudá-los; são eles os modelos de deposição balística (DB) [5, 6], deposição aleatória (DA), e deposição aleatória com relaxação de superfície (DAR) [35]. São modelos bastante simples, para a deposição de uma única espécie que, apesar da simplicidade, abrangem grande parte da teoria voltada para o estudo dos modelos de crescimento [4, 25]. Também nos primeiros capítulos, são introduzidas algumas técnicas de análise numérica que serão extensivamente utilizadas nos capítulos seguintes, e têm importância fundamental na obtenção de resultados conclusivos para o modelo de deposição balística bidispersa, apresentado na Sec. 4.5. Nos Caps. 5 e 6, o modelo DBB é inserido na teoria contínua e de escala dos modelos de crescimento, que é introduzida em paralelo com a apresentação modelos DB, DA e DAR nos Caps. 2, 3, e 4.

1.2 Modelos Competitivos

Modelos competitivos são modelos de crescimento para processos em que mais de uma espécie é depositada, ou processos em que a agregação de uma espécie possa obedecer mecanismos diferentes. Em particular, estudamos o caso de misturas binárias, em que dois tipos de partículas são depositadas. Nesses modelos, partículas são depositadas com uma certa taxa, e cada uma das espécies é depositada com uma probabilidade complementar. Cada espécie é depositada segundo as regras de agregação de um modelo conhecido; nesse sentido,

as dinâmicas de deposição associadas aos dois modelos competem, tendo como parâmetro a probabilidade de deposição de uma das espécies, e daí deriva o nome desta classe de modelos.

Os modelos competitivos são uma extensão dos modelos de crescimento de uma única espécie, idealizados para aplicação no crescimento de policristais e deposição de misturas, por exemplo.

O Cap. 4 faz uma revisão completa dos desdobramentos mais recentes da teoria dos modelos competitivos, aplicada à competição com a deposição aleatória. A competição com a deposição aleatória é o contexto adequado para estudar o modelo de deposição balística bidispersa, e um dos principais pontos desta revisão é reafirmar de forma definitiva o comportamento de escala muito particular destes modelos. Na Sec. 4.2 uma teoria de escala formulada para a rugosidade é apresentada [57, 58], e explica bastante bem o efeito da componente aleatória sobre a velocidade com que as correlações se desenvolvem pelo substrato, prevendo expoentes de escala obtidos numericamente. A teoria de escala para a rugosidade também se mostra importante na conexão entre propriedades da superfície interna do depósito e os mecanismos de enrugamento na superfície para o modelo DBB; esta conexão é o tema do Cap. 6.

Ainda no Cap. 4, analisamos em detalhe a conexão entre os modelos competitivos e as equações estocásticas de crescimento, feita pela passagem ao limite das taxas microscópicas de transição entre sítios da rede [31, 47]. Expoentes de escala são obtidos dos coeficientes das equações de crescimento resultantes, e uma comparação com os expoentes obtidos numericamente é feita na Sec. 4.4.

1.3 O Modelo DBB

O modelo de deposição balística bidispersa (DBB) é um modelo em que a deposição de partículas de dois tamanhos diferentes competem. O modelo DBB foi originalmente idealizado para descrever processos de formação de rochas porosas [64], para compreender melhor o papel destes processos para algumas propriedades morfológicas como permeabilidade, porosidade e geometria da superfície dos poros, e reproduí-las. Depósitos formados por DBB têm a fase sólida conectada por construção, e a análise da conectividade dos poros revela que a estrutura porosa é percolante à baixas porosidades, que são características absolutamente desejáveis para este objetivo [64, 65].

O modelo DBB é relevante porque, a despeito da sua simplicidade, é capaz de reproduzir a geometria da estrutura interna e o processo de formação de sistemas reais, baseando a regra de agregação unicamente na observação de que

grãos de areia em depósitos porosos atendem a uma distribuição de tamanho aproximadamente bimodal [7, 8]. A regra de agregação do modelo DBB é tão simples quanto empilhar aleatoriamente blocos de tamanho $1 \times 1 \times 1$ e $2 \times 1 \times 1$ em rede; a deposição dos blocos maiores (dímeros) é capaz de criar poros, e é a responsável pela estrutura não trivial do depósito.

Talvez o único mecanismo de deposição mais simples que DBB seja a deposição aleatória, que, contudo, não é capaz de gerar correlações entre colunas, e não manifesta comportamento de escala. Em duas dimensões, o modelo DBB pode ser comparado a um simplificado jogo “cego” de *tetris*¹ [65]!

Neste trabalho, buscamos localizar de forma precisa o modelo DBB no cenário dos modelos discretos competitivos. A classe dos modelos competitivos é bem descrita por uma hipótese de escala generalizada formulada para a largura de interface [59, 60, 61] e, para esta tarefa, fizemos uso das técnicas sistemáticas de extrapolação apresentadas no Cap. 2 para eliminar efeitos de tamanho e tempo finito, muito relevantes no regime de baixas porosidades, e obter expoentes assintóticos corretos. A classe de universalidade da dinâmica da interface gerada por DBB obtida por *scaling* é confirmada por coeficientes da equação de crescimento associada ao modelo pela teoria contínua, e amparada por uma quantidade de resultados numéricos no Cap 5.

Resultados obtidos por outros autores [66] apontam uma transição entre dinâmicas de crescimento em função da probabilidade com que as partículas maiores (dímeros, de dimensões $2 \times 1 \times 1$) são depositadas em $d = 3$ dimensões. Esta transição não está de acordo com o comportamento esperado da competição com a deposição aleatória [57, 58], e é investigada sob os vários aspectos que permeiam a matéria nos Caps. 4, 5 e 6.

Ainda no Cap. 6, observamos ser possível relacionar as propriedades geométricas do depósito à morfologia da superfície, via teoria de escala. A análise da estrutura do depósito DBB reforça as conclusões sobre o comportamento do modelo em qualquer regime de porosidade, e apresenta expoentes característicos de outro modelo na mesma classe de universalidade, criando um possível novo contexto para classificar os modelos de crescimento [72]. Isto certamente motiva investigação mais demorada sobre tema.

¹Jogo originalmente implementado por Alexey Pajitnov, em 1984. Neste jogo, uma sequência pseudoaleatória de *tetrad*es – formas conectadas de 4 blocos quadrados – cam verticalmente sobre uma linha, agregando-se irreversivelmente. (Fonte: *wikipedia.org*.)

Capítulo 2

Modelos de Crescimento Discretos

O estudo da morfologia de superfícies tem aplicações práticas em várias áreas de conhecimento [4]. Estabelecer os parâmetros da formação e crescimento de superfícies rugosas na natureza pode ser um problema de difícil solução. Uma das abordagens possíveis para o problema consiste em formular modelos computacionais simples, que observem não mais que algumas simetrias do sistema a ser descrito. *Teorias de escala* nos permitem definir expoentes que dependem apenas dessas simetrias para os modelos, e então classificá-los em *classes de universalidade*. As classes de universalidade agrupam sistemas similares, no sentido de que seus expoentes correspondem ao mesmo conjunto de simetrias.

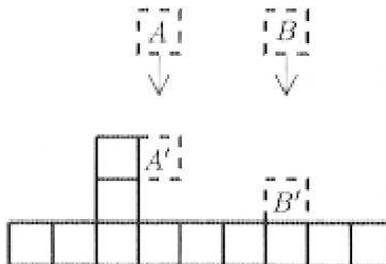
Nas seções a seguir, apresentaremos um modelo bastante simples para o crescimento de filmes finos (embora sem solução exata em duas dimensões!) que apresenta, não obstante, grande riqueza fenomenológica e, por isso, serve bastante bem para introduzir conceitos importantes para os capítulos que se seguem – trata-se do modelo de *deposição balística*. As seções subsequentes se ocupam de desenvolver esses conceitos, e apresentar alguns métodos de análise numérica. Neste capítulo, também apresentamos o modelo de *deposição aleatória*, e sua solução exata.

2.1 Deposição Balística (DB)

Nos modelos de crescimento de filmes, um sítio \mathbf{x} em uma superfície $(d - 1)$ -dimensional em d dimensões (o *substrato*) é escolhido aleatoriamente no instante t , e a altura $h(\mathbf{x}', t)$ do sítio \mathbf{x}' muda como $h(\mathbf{x}', t) \rightarrow h(\mathbf{x}', t + \delta t)$, segundo certas regras de ocupação. Em geral, $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ é da ordem da primeira vizinhança, e o substrato é inicialmente “plano”, com $h(\mathbf{x}, 0) = 0$ para todos os sítios da rede.

Na deposição balística, um sítio \mathbf{x} é escolhido em t , e as alturas em \mathbf{x} e nos primeiros vizinhos \mathbf{x}'_j são computadas. Se $h(\mathbf{x}, t) < h(\mathbf{x}'_j, t)$ para, digamos $j = m$, a altura $h(\mathbf{x}, t + \delta t)$ em \mathbf{x} é igualada à altura $h(\mathbf{x}'_m, t)$ em \mathbf{x}'_m . Se $h(\mathbf{x}, t) \geq h(\mathbf{x}'_j, t)$ para todo j , então $h(\mathbf{x}, t + \delta t) \leftarrow h(\mathbf{x}, t) + 1$. Em $d = 2$ ($d = 3$) dimensões, podemos imaginar partículas caindo verticalmente sobre uma linha reta (sobre um substrato plano), e agregando-se ao primeiro contato a uma partícula depositada. A Figura 2.1 ilustra essa imagem pictórica no caso $d = 2$ dimensões.

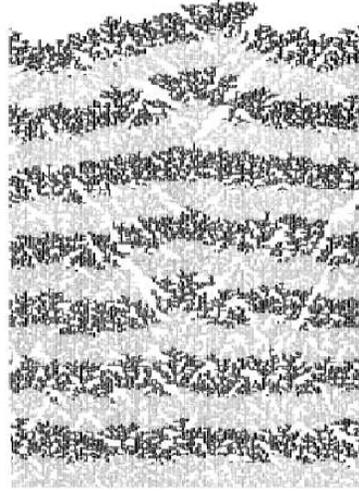
Figura 2.1: DB em $d = 2$ dimensões. Uma posição é escolhida aleatoriamente acima do substrato, e uma partícula “cai” verticalmente, se agregando ao primeiro sítio com um primeiro vizinho ocupado. A figura ilustra as posições de agregação A' , B' das partículas incidentes A , B . Extraída de [4].



As partículas depositadas formam um agregado poroso, como os ilustrados nas Figuras 2.2 e 2.3. Definimos *superfície* (ou *interface*) como o lugar geométrico das alturas $h(\mathbf{x}, t)$, i.e. o conjunto de partículas de maior altura em cada sítio. A interface entre o agregado de partículas ocupadas e o agregado de partículas desocupadas (ou, simplesmente, o *vazio* acima do agregado) é uma superfície que enrugua à medida que mais partículas são depositadas. Isto está de acordo com a intuição: a ausência de mecanismos de relaxação para a posição de menor altura global, que caracteriza os sistemas em equilíbrio, e o elemento aleatório (escolha do sítio onde a partícula será depositada) envolvidos no processo sugerem que, após certo tempo, a interface deverá ser rugosa [10].

Note que o campo $h(\mathbf{x}, t)$ não permite representar bolhas ou projeções da interface sobre si mesma (*overhangs*). Isto não é verdade para os processos de crescimento em geral (ou mesmo para o modelo DB; basta uma rápida inspeção das Figs. 2.2 e 2.3), e *overhangs* podem ter efeitos particularmente importantes sobre a dinâmica de tempos longos [11].

Figura 2.2: Agregado DB obtido pela deposição de 35000 partículas, em $d = 2$ dimensões. O substrato horizontal tem tamanho $L = 200$, em unidades de rede. Cada camada, identificada pelos tons claro e escuro, indica a deposição de 2500 partículas; assim, é possível acompanhar, qualitativamente, a evolução da rugosidade com o tempo. Extraída de [4].



Para acompanhar o enrugamento (*roughening*) da superfície em termos quantitativos, analisamos as flutuações nas alturas locais do depósito. Definimos a *altura média* em um instante genérico t como

$$\bar{h}(t) \equiv \frac{1}{L^{d-1}} \sum_{\mathbf{x}} h(\mathbf{x}, t), \quad (2.1)$$

onde L são as dimensões lineares do substrato, e a soma se estende sobre todos os sítios. A unidade de tempo é definida geralmente pela deposição de uma monocamada de partículas (uma partícula para cada sítio do substrato). Definimos também a *rugosidade*, ou *largura da interface*, como a flutuação *rms* das alturas,

$$\xi(L, t) \equiv \left\langle \sqrt{\frac{1}{L^{d-1}} \sum_{\mathbf{x}} [h(\mathbf{x}, t) - \bar{h}(t)]^2} \right\rangle, \quad (2.2)$$

ou, alternativamente, a *rugosidade quadrática*

$$W^2(L, t) \equiv \left\langle \frac{1}{L^{d-1}} \sum_{\mathbf{x}} [h(\mathbf{x}, t) - \bar{h}(t)]^2 \right\rangle, \quad (2.3)$$

onde os colchetes angulares ($\langle \cdot \rangle$) denotam a média configuracional, ie. a média do desvio quadrático da altura média calculada sobre muitos depósitos

Figura 2.3: Corte vertical de um depósito DB em $d = 3$ dimensões. O substrato, plano horizontal, tem tamanho 128×128 , em unidades de rede. A figura foi obtida pela deposição de 4480 partículas. Extraída de [9].



diferentes¹.

Na Fig. 2.4, mostramos gráficos de $\log W$ versus $\log t$ para DB, em $d = 2$. Para tempos muito curtos, até $t \approx 10$, a rugosidade passa por um regime transiente, no qual W cresce rapidamente [12], facilmente identificado na Fig. 2.4(a). Após o transiente, começa o regime de crescimento, que se estende até a região de transição para o regime estacionário, onde a largura de interface atinge um valor independente do tempo. A evolução temporal da rugosidade mostra uma escala de tempo característica t_\times , que separa dois regimes de crescimento diferentes. Inicialmente ($10 \lesssim t \ll t_\times$),

$$W(L, t) \sim t^\beta. \quad (2.4)$$

O expoente β é chamado *expoente de crescimento*, e caracteriza a dinâmica dependente do tempo. Para $t \gg t_\times$, a rugosidade atinge seu *valor estacionário*, ou de *saturação* W_{sat} . A figura 2.4(b) mostra um gráfico log-log de curvas de $W(t)$ para alguns tamanhos de substrato típicos. Os valores de W_{sat} igualmente espaçados sugerem

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

onde α é o *expoente de rugosidade*. Também é possível ver, por estas curvas, que t_\times depende do tamanho do sistema como

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

onde z é chamado *expoente dinâmico*.

¹Em simulações numéricas, isso é feito simulando depósitos com sementes diferentes para o gerador de números aleatórios.

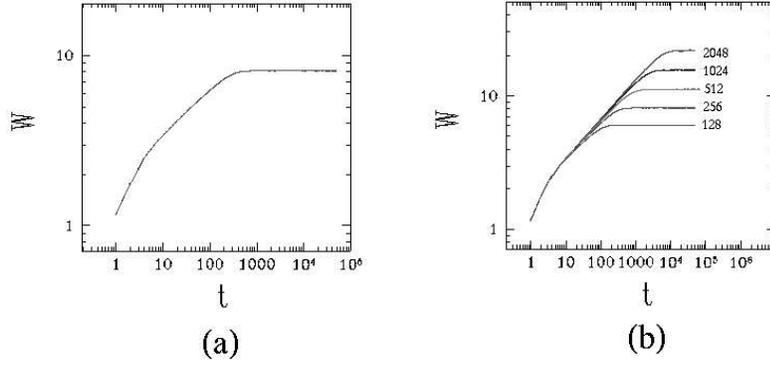


Figura 2.4: A figura (a) mostra a evolução temporal da rugosidade em $d = 2$ para deposição balística em um substrato de tamanho $L = 256$. A figura (b) mostra $\log W$ versus $\log t$ para os tamanhos de substrato $L = 128$ a $L = 2048$, também em $d = 2$ dimensões.

2.2 Scaling

As equações 2.4, 2.5 e 2.6 sugerem que, plotando $W' = W(L, t)/L^\alpha$ versus $t' = t/L^z$, as curvas de rugosidade deverão ser as mesmas para todos os valores de t' (v. Figura 2.5). Isto é uma assinatura de comportamento de escala, ou *scaling*. A função W é homogênea generalizada nos seus argumentos, e tem a forma [13]

$$W \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (2.7)$$

onde α, z são *expoentes de escala* e f é uma *função de escala* que atende a $f(u) \sim u^\beta$ para $u \ll 1$ e $f(u) \sim \text{cte.}$ para $u \gg 1$.

Funções de escala como esta são encontradas no estudo dos fenômenos críticos. Tipicamente, próximo ao ponto crítico, o comprimento de correlação e os calores específicos divergem como potências do campo aplicado [15, 14] e da temperatura, como resultado de flutuações em todas as escalas de comprimento [16]. Uma das ferramentas usadas para obter relações de escala entre os expoentes críticos obtidos experimentalmente é fazer uma *hipótese de escala* para o potencial termodinâmico $G(\epsilon, H)$ relevante [17], na forma

$$G(\lambda^{a_\epsilon} \epsilon, \lambda^{a_H} H) = \lambda G(\epsilon, H),$$

onde λ é um fator de escala arbitrário. Escolhendo $\lambda = H^{-1/a_H}$, por exemplo, obtemos

$$G(\epsilon, H) = H^{1/a_H} g(H^{-a_\epsilon/a_H} \epsilon),$$

com $g(x) = G(x, 1)$. Esta equação tem a mesma forma que a Eq. 2.7, e é chamada *hipótese de escala fenomenológica*. A Eq. 2.7 é uma hipótese de escala

para a evolução temporal do enrugamento de superfícies, e é por isso chamada *hipótese de escala dinâmica*.

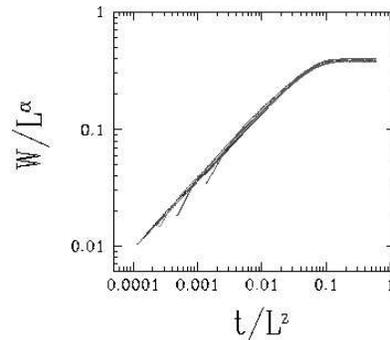


Figura 2.5: Curvas $W(L, t)/L^\alpha$ versus t/L^z para os tamanhos de substrato $L = 128$ a 2048 em $d = 2$.

Note que a Eq. 2.7 não determina os expoentes de escala α, z . Por outro lado, em $t = t_\times$, devemos ter $W(t_\times) \sim W_{\text{sat}}(L)$, ou, pela Eq. 2.6, $L^{\beta z} \sim L^\alpha$, donde os expoentes α, β e z não podem ser todos independentes, mas atendem à *relação de escala*

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (2.8)$$

A Eq. 2.8 deve ser válida para qualquer processo de crescimento que atenda à hipótese de escala Eq. 2.7 [4].

Alternativamente, a Eq. 2.7 segue naturalmente de conceitos de *auto-afinidade*, e é uma característica intrínseca das superfícies que compartilham desta propriedade [4, 18, 19, 20]. Uma superfície $h(\mathbf{x})$ auto-afim é *estatisticamente* invariante sob as transformações de escala

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = b\mathbf{x}$$

$$h \rightarrow h' = b^\chi h,$$

onde b é o *fator de escala* do eixo $\overline{O\mathbf{x}}$, e χ é chamado *expoente de auto-afinidade*. Em termos gerais,

$$h'(b\mathbf{x}) \sim b^\chi h(\mathbf{x}). \quad (2.9)$$

A Figura 2.6 mostra uma curva auto-afim $h(x)$ com expoente $\chi = 1/2$, gerada por um passeio aleatório em rede em 1 dimensão, reescalada de várias maneiras diferentes [18]. Uma importante consequência da Eq. 2.9 é que a *função de correlação altura-altura*

$$H(s) = L^{-d} \sum_{\mathbf{x}} [h(\mathbf{x} + s) - h(\mathbf{x})]^2$$

de dois pontos separados por uma distância s escala como [4, 19]

$$H(s) \sim s^{2\chi}. \quad (2.10)$$

Se admitimos que a interface gerada por crescimento DB é auto-afim, e invariante sob as transformações

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = b\mathbf{x}$$

$$t \rightarrow t' = b^z t$$

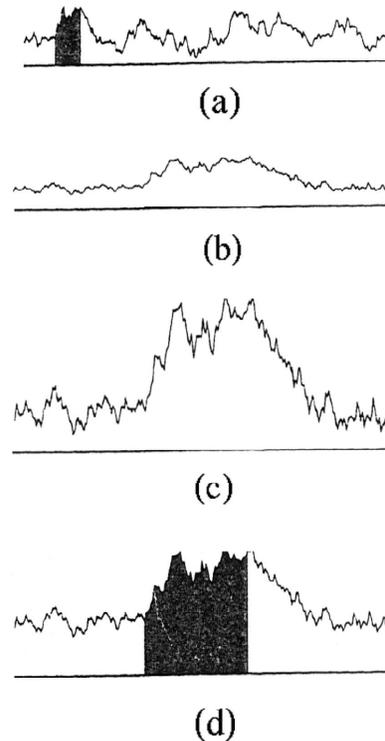
$$h \rightarrow h' = b^\chi h,$$

então a rugosidade deve escalar como

$$W(L, t) \sim b^{-\chi} W'(bL, b^z t).$$

O fator de escala b é arbitrário; escolhendo $b = L^{-1}$, recuperamos imediatamente a Eq. 2.7, com $f(u) = W(1, u)$ e $\chi = \alpha$.

Figura 2.6: Nesta figura, $h(x)$ (curva (a)) é reescalada por um fator $b = 4$ no eixo \overline{Ox} , mantendo a escala do eixo \overline{Oh} (curva (b)). Em (b), 3/4 da curva original foram deslocados para a direita, e se encontram fora do gráfico. Note que as duas curvas são, mesmo por inspeção visual, bastante diferentes ((b) é bem mais lisa). A curva (c) mostra a mesma curva (a), agora reescalada por um fator $b = 4$ em ambos os eixos. Novamente, obtemos duas curvas diferentes mesmo a olho nu ((c) é bem mais rugosa). Na curva (d), a curva (a) é reescalada por um fator $b = 4$ no eixo \overline{Ox} e por um fator $b^\alpha = \sqrt{4} = 2$ no eixo \overline{Oh} (que são os fatores de escala apropriados). As curvas (a) e (d) são estatisticamente equivalentes (p.ex., têm as mesmas rugosidade e expoente de auto-afinidade χ) e, conseqüentemente, muito mais parecidas. As regiões sombreadas marcam uma área sob a curva (a), e sua contrapartida devidamente reescalada em (d). Extraída de [18]

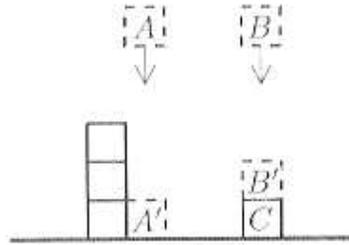


2.3 Deposição Aleatória (DA)

A deposição aleatória é provavelmente o modelo de geração de interfaces fora do equilíbrio mais simples que se pode conceber. Em cada passo da deposição

aleatória, um sítio \mathbf{x} do substrato é escolhido aleatoriamente e a altura $h(\mathbf{x}, t)$ é incrementada em uma unidade (v. Fig. 2.7). A Fig. 2.8 mostra um agregado típico, resultante da deposição de partículas segundo a regra DA.

Figura 2.7: A Figura mostra duas possibilidades típicas de agregação segundo a regra de deposição do modelo DA. Na deposição aleatória, uma partícula “cai” verticalmente, até atingir o topo da coluna \mathbf{x} escolhida em t , onde agrega-se irreversivelmente, incrementando a altura $h(\mathbf{x}, t)$ da coluna. Extraída de [4].



Para este modelo simples, podemos calcular a forma fechada de $W(L, t)$. A probabilidade $P(h, N)$ de que uma coluna tenha altura h após a deposição de N partículas é

$$P(h, N) = \binom{N}{h} p^h (1-p)^{N-h}, \quad (2.11)$$

onde $p = 1/L^{d-1}$, e o tempo é definido como o número de monocamadas depositadas, $t = N/L^{d-1}$. A Eq. 2.11 é a probabilidade de que h dentre N partículas sejam depositadas em um mesmo sítio, digamos \mathbf{x} , em qualquer ordem. Como as colunas são completamente descorrelacionadas, e todas são equivalentes, as médias espaciais e configuracionais de altura são as mesmas, e

$$\langle h \rangle = \sum_h h P(h, N)$$

e

$$\langle h^2 \rangle = \sum_h h^2 P(h, N).$$

Destas equações, e obtemos [4, 21]

$$W = \sqrt{\frac{N}{L^{d-1}} \left(1 - \frac{1}{L^{d-1}} \right)},$$

onde $\beta = 1/2$ em qualquer instante [4].

2.4 Correlações e Regime de Saturação

Em uma interface gerada por DA, a rugosidade cresce indefinidamente com tempo, em franco contraste com o que acontece na deposição balística. Isso nos leva a ponderar sobre os mecanismos que levam à saturação da rugosidade em interfaces geradas por DB, e não por DA.

Figura 2.8: Agregado DA obtido pela deposição de 16000 partículas, em $d = 2$. O substrato tem tamanho $L = 100$, em unidades de rede. Cada camada, identificada pelos tons claro e escuro, indica a deposição de 4000 partículas. Extraída de [4].



A primeira diferença marcante entre os dois modelos é a *geração de correlações* entre colunas vizinhas, ausente na interface gerada por DA [4].

Considere então o comportamento de uma certa medida termodinâmica das flutuações em um sistema (um calor específico ou uma susceptibilidade, por exemplo), C , com o qual faremos analogias. Na criticalidade, C diverge enquanto o comprimento de correlação, que é uma escala característica das flutuações, diverge como $\xi \sim \epsilon^{-\nu}$, onde $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ é a temperatura reduzida e ν um expoente crítico. Em sistemas cujo tamanho é determinado por uma dimensão linear² L , o calor específico C deve escalar com a variável $y = L/\xi$ [22, 24]. Se $y \gg 1$, espera-se que C se comporte como num sistema infinito (“*bulk behaviour*”, [22]),

$$C \sim \epsilon^{-\beta} \quad (2.12)$$

(não se deve confundir o expoente β definido na Eq. 2.12 com o expoente de crescimento definido na Eq. 2.4). À medida que $y \rightarrow 0$, C manifesta um desvio da Eq. 2.12, refletindo o fato de que as correlações são limitadas de alguma forma por L [23, 22]. A base da *hipótese de escala de tamanho finito* [23] é que a temperatura $T^*(L)$ (“*rounding temperature*”, [23]) em que este desvio se torna

²O sistema, nesse caso, pode ser finito (por exemplo, um cubo de dimensões $L \times L \times L$) ou infinito (por exemplo, um prisma infinito de base $L \times L$) [16].

pronunciado é determinada por

$$\xi(T^*) \sim L.$$

A forma de escala de C quando $y \ll 1$ depende da geometria e da dimensionalidade do sistema. Em sistemas finitos no sentido estrito, espera-se o aparecimento de um ponto estacionário $\tilde{C} = C(\tilde{\epsilon})$ em uma temperatura \tilde{T} , cuja amplitude e abscissa escalam com o tamanho do sistema [22, 16].

Na deposição balística, as correlações entre as alturas dos sítios também se espalham pela interface à medida que mais partículas são depositadas, de vez que a agregação lateral (partícula A na Fig. 2.1) reduz as flutuações aleatórias nas alturas das colunas vizinhas [4, 25]. A distância típica $\xi_{||}$ sobre a qual as alturas estão correlacionadas é chamada *comprimento de correlação lateral*. Para *qualquer* processo cinético de enrugamento de superfícies (“*kinetic roughening*”), devemos esperar que [25]

$$\xi_{||} \sim t^{1/z}. \quad (2.13)$$

Para um sistema finito, $\xi_{||}$ não pode crescer indefinidamente, mas é limitado por L , atendendo restrições de escala análogas às de um sistemas de spins, por exemplo. Ref. [4] argumenta que a saturação ocorre quando

$$\xi_{||} \sim L,$$

e as flutuações de altura estão correlacionadas em todas as escalas, até as dimensões lineares do substrato. Substituindo $\xi_{||}$ por L na Eq. 2.13, recuperamos a Eq. 2.6, se o expoente z definido na Eq. 2.13 é o próprio expoente dinâmico.

A correlação entre colunas vizinhas criada pela regra de agregação DB e, em nível mais alto, a comunicação dessas correlações lateralmente e por toda a interface, é a responsável pela geração de uma interface auto-afim em escalas de comprimento menores que $\xi_{||}$. Por outro lado, a interface gerada por DA tem colunas completamente descorrelacionadas em todas as escalas (i.e. $H \sim W^2$ na Eq. 2.10). A interface DA não é auto-afim (não se define χ para DA), e hipóteses de escala na forma da Eq. 2.7 não se aplicam.

2.5 Análise Numérica

As Eqs. 2.4 a 2.6 que definem expoentes críticos são válidas apenas assintoticamente; ie., por exemplo, os valores de rugosidade de saturação W_{sat} são tanto mais coerentes com $W_{\text{sat}} \sim L^\alpha$ quanto mais nos aproximamos do limite $L \rightarrow \infty$. Essas equações têm a forma geral

$$f(x, y) \sim y^{\lambda_0} \quad (2.14)$$

se $x \rightarrow 0$ e $y \rightarrow 0$, onde λ_0 é um expoente e f a função de escala. Esta notação antes indica a existência do limite

$$\lim_{\substack{y \rightarrow 0 \\ x \rightarrow 0}} \frac{\log f(x, y)}{\log y} = \lambda_0,$$

do que faz qualquer asserção sobre a forma funcional de f [17]. Em geral, existem correções à escala na Eq. 2.14, da forma

$$f(x, y) = y^\lambda [1 + f_1(x, y) + f_2(x, y) + \dots]$$

onde $f_i(x, y) = x^{a_i} y^{b_i}$ e a_i, b_i e $\lambda = \lambda_0$ são expoentes (os coeficientes foram omitidos, por simplicidade). O reflexo dessas correções é que, admitindo que

$$f(x, y) \approx Ay^\lambda$$

se $|y| < \delta y$ e $|x| < \delta x$, para $\delta y, \delta x \neq 0$ suficientemente pequenos e constantes Δ, A apropriadas, λ deve depender de x e y como [12]

$$\lambda \approx \lambda_0 + Ax^\eta + By^\epsilon, \quad (2.15)$$

com expoentes η, ϵ adequados e A, B constantes³. O intervalo $\delta x \times \delta y$ de validade da Eq. 2.15 é chamado *região de escala*.

Na prática, o limite das variáveis x, y não pode sempre ser atingido, e as correções à escala são importantes. Como exemplo de aplicação dessas idéias, as duas secções a seguir ilustram a estimativa dos expoentes definidos nas Eqs. 2.4 a 2.6 e as correções à escala, para o modelo de deposição balística em $d = 2$. Observe que se as correções de tempo e tamanho finito aos expoentes de escala são grandes, o colapso de dados como o ilustrado na Fig. 2.5 *falha* em escalar todos os $W(L, t)$ na mesma função de escala.

2.5.1 Expoente de Crescimento

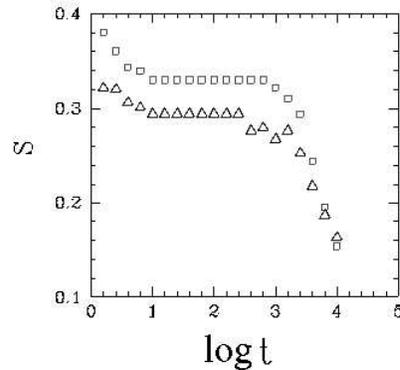
O expoente de crescimento β pode ser estimado, inicialmente, por um ajuste linear direto de $W(t)$ na região em que W cresce como t^β , e $\log W(\log t)$ tem boa correlação linear (v. Fig. 2.4). O ajuste linear direto, ou “cego”, em uma região escolhida por simples inspeção visual pode, no entanto, levar a valores discrepantes de β [4]. Uma técnica bastante útil para determinar a região de escala nesse caso é o uso de *inclinações sucessivas*. As inclinações $D[f(x)]$ aproximam a tangente à curva $f(x)$ em x . Para qualquer conjunto discreto de pontos,

$$D[f(x)] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j},$$

³V. também apêndice em Ref. [26], para maior detalhe sobre o uso dos símbolos “ \sim ” e “ \approx ”, e seus significados precisos nesse contexto.

onde $x = (x_i + x_j)/2$ e os índices i, j enumeram os elementos. A Fig. 2.9 mostra um gráfico das inclinações sucessivas $s = D[\log W(\log t)]$ da curva $\log W(\log t)$, para dois tamanhos de substrato diferentes, L_1, L_2 .

Figura 2.9: Inclinações sucessivas $s(L, t)$ de $\log W$ contra $\log t$ para os tamanhos de substrato L_1 (\square) e L_2 (\triangle), com $L_1 > L_2$. Esta figura é apenas uma ilustração (não foi obtida a partir de dados de simulações) e mostra, por exagero, as principais características deste tipo de gráfico, como a região transiente e o *crossover* para o regime de saturação (v. Fig. 2.4).



Por esta figura, é possível ver como a curva $\log W(\log t)$ desvia-se da linha reta (platô horizontal na Fig. 2.9) abaixo do transiente e acima do *crossover* para o regime estacionário (no regime transiente, no início do processo, os sítios estão completamente descorrelacionados, e o processo tem características de deposição aleatória, com $\beta \approx 1/2$) e marca de forma inequívoca a região de escala. Os expoentes estimados nessa região podem todavia depender de L ; pela Eq. 2.15, as inclinações sucessivas s têm a forma geral

$$s \approx \beta(L) + Ct^\epsilon,$$

onde [12]

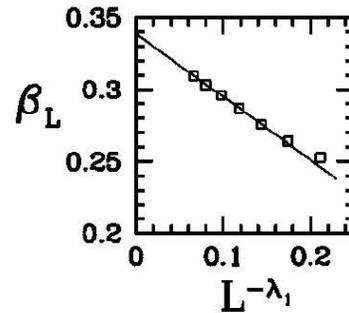
$$\beta(L) \approx \beta + AL^{-\lambda} \quad (2.16)$$

é um *expoente efetivo*, C, λ e A são constantes. Se a correção à escala é fraca, espera-se que as inclinações sucessivas $s(L, t)$ se dispersem em torno de uma reta horizontal na região de escala, como na Fig. 2.9, onde $\epsilon \approx 0$.

A Fig. 2.10 mostra um gráfico $\beta(L)$ versus $L^{-\lambda}$. Pela extrapolação adequada da curva neste gráfico, obtemos o expoente de crescimento β . O expoente λ é escolhido de forma a maximizar a correlação linear dos primeiros quatro pontos (maiores valores de L).

O expoente de crescimento da deposição balística é consistente com seu valor exato em $d = 2$, $\beta = 1/3$, com correções à escala $0.2 < \lambda < 0.4$. Em $d = 3$, $\beta = 0.229 \pm 0.005$, com $\lambda \sim 1$ [12].

Figura 2.10: Expoentes efetivos β_L versus $L^{-\lambda}$. Como não há argumento para prever seu valor, λ é escolhido de forma a maximizar a correlação linear dos pontos. Nesta figura, β_L foi estimado para os tamanhos de substrato $L = 2^n$ ($n = 4, \dots, 10$) em $d = 2$, com $\lambda = 0.28$. Extraído de [12]



2.5.2 Expoente de Rugosidade

A rugosidade de saturação escala com o tamanho do sistema como $W_{\text{sat}} \sim L^\alpha$. Para apreciar as correções à escala, definimos expoentes efetivos

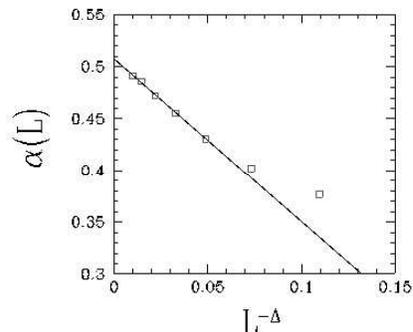
$$\alpha(L) = \frac{\log [W_{\text{sat}}(L'')/W_{\text{sat}}(L')]}{\log(L''/L')}, \quad (2.17)$$

onde $L = \sqrt{L''L'}$ e L''/L' é um parâmetro fixo. Os expoentes $\alpha(L)$ são as inclinações sucessivas da curva $\log W_{\text{sat}}(\log L)$. Como o expoente efetivo $\beta(L)$, o expoente de rugosidade também apresenta correções de tamanho finito fortes na deposição balística:

$$\alpha(L) \approx \alpha + BL^{-\Delta}, \quad (2.18)$$

onde Δ é um expoente de correção à escala na Eq. 2.5 e B é uma constante. A Fig. 2.11 mostra um gráfico $\alpha(L)$ versus $L^{-\Delta}$. A análise é completamente similar à da Fig. 2.10.

Figura 2.11: Expoentes efetivos $\alpha(L)$ versus $L^{-\Delta}$, obtidos de dados de deposição balística em $d = 2$. Nesta figura, $\Delta = 0.58$; a reta é um ajuste de mínimos quadrados dos primeiros cinco pontos do gráfico (maiores valores de L). Os dados de rugosidade de saturação usados nesta figura foram extraídos de [12].



O expoente de rugosidade da deposição balística é consistente com seu valor exato em $d = 2$, $\alpha = 1/2$, com correções à escala $0.6 < \Delta < 0.8$ [12]. Em $d = 3$, $\alpha = 0.383 \pm 0.008$, com correções à escala $0.3 < \Delta < 0.8$ [27].

2.5.3 Expoente Dinâmico

Há diversos métodos para estimar t_\times , e talvez o mais simples seja o ilustrado na Fig. 2.12. Para calcular o expoente z , e as correções à escala na Eq. 2.6, definimos, a partir de t_\times , expoentes efetivos

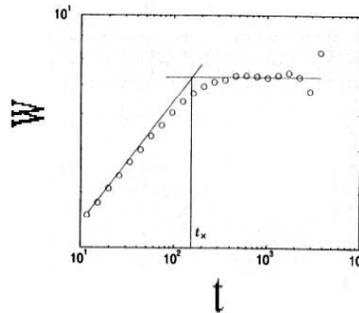
$$z(L) = \frac{\log [t_\times(L'')/t_\times(L')]}{\log(L''/L')}, \quad (2.19)$$

onde, como na Eq. 2.17, $L = \sqrt{L''L'}$ e L''/L' é um parâmetro. Os expoentes $z(L)$ são as inclinações sucessivas da curva $\log t_\times(\log L)$. Esperamos que

$$z(L) \approx z + DL^{-\sigma}, \quad (2.20)$$

onde σ é uma correção à escala e D uma constante.

Figura 2.12: A figura indica um método simples de estimar t_\times , pela intersecção de duas retas de ajuste nas regiões de alta correlação linear nos regimes de crescimento e estacionário. Extraído de [4].



Formalmente, a escala de tempo t_\times , definida na Eq. 2.6 para a rugosidade, deve ser a mesma para o desvio

$$\Delta W = W_{\text{sat}} - W(L, t)$$

do valor estacionário W_{sat} . Ref. [28] verificou que ΔW decai exponencialmente para alguns modelos de crescimento,

$$\Delta W \sim \exp(-t/\tau), \quad (2.21)$$

onde $\tau = t_\times$ (v. Fig. 2.13). A estimativa de τ por ajuste linear de curvas $\log \Delta W(L, t)$ apresenta ambiguidades na escolha da região de ajuste (como no ajuste cego de $\log W(\log t)$ e $\log W_{\text{sat}}(\log L)$ para obter β e α , respectivamente). Ref. [28] adotou, para os modelos que atendem a Eq. 2.21, um método indireto para estimar τ , baseado nas relações que seguem.

Pelas Eqs. 2.7 e 2.21, devemos ter, numa vizinhança de t_\times ,

$$f(x) = a - b \exp(-x),$$

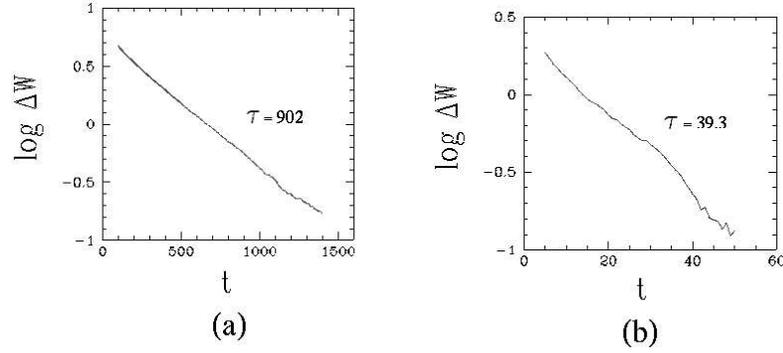


Figura 2.13: Evolução temporal do desvio $\Delta W(L, t)$ para DB em $d = 2$, para os tamanhos $L = 512$ (a) e $L = 64$ (b). O coeficiente linear da reta de ajuste na região de alta correlação linear é $1/\tau$. O valor de τ obtido por ajuste linear direto é indicado para cada tamanho.

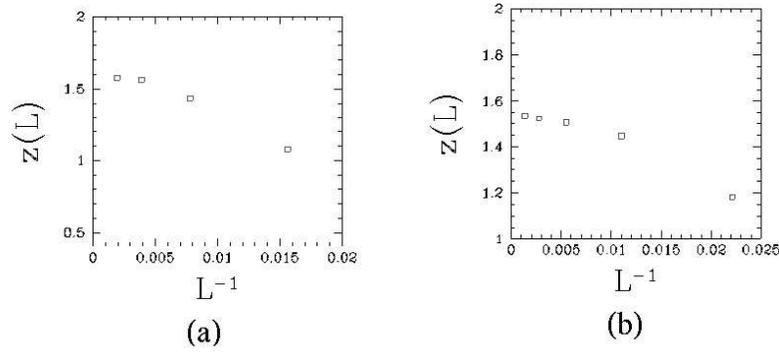


Figura 2.14: Expoentes efetivos $z(L)$ versus $L^{-\sigma}$, obtidos da deposição balística em $d = 2$, com $\sigma = 1$. Os pontos em (a) foram obtidos a partir de tempos característicos τ_k , calculados usando $k = 0.6$; os pontos em (b), usando $k = 0.8$ (Eq. 2.24).

com $a = W_{\text{sat}}/L^\alpha$ e b constantes. Definindo um tempo característico τ_k por

$$W(L, \tau_k) = kW_{\text{sat}}, \quad (2.22)$$

com $k \lesssim 1$ constante, então segue destas equações que

$$\tau_k \approx G(k)t_\times, \quad (2.23)$$

onde $G(k) = \ln[b/a(1-k)]$ é uma constante. A partir de τ_k , definimos expoentes efetivos

$$z(L; k) = \frac{\log[\tau_k(L'')/\tau_k(L')]}{\log(L''/L')}, \quad (2.24)$$

para cada valor de k . Os $z(L; k)$ perseguem a tangente à curva $\log \tau_k(\log L)$ a k fixo e, pela Eq. 2.23, devemos esperar que k não afete os expoentes efetivos

$z(L; k)$, i.e.

$$z(L; k) \approx z(L)$$

para qualquer k tal que $W(L, \tau_k)$ seja uma rugosidade dentro do intervalo de validade da Eq. 2.21.

A Fig. 2.14 mostra curvas $z(L^{-\sigma})$ obtidas a partir de τ_k para dois valores de k . Tipicamente, os tempos característicos τ_k resultam em melhores resultados na estimativa de z , se comparados com t_{\times} (obtido pela forma mostrada na Fig. 2.12, por exemplo). Isso ocorre principalmente porque $\tau_k(L)$ é estimado fora do regime de saturação, onde as flutuações de rugosidade são relativamente grandes (tempos grandes na Fig. 2.13), e a propagação dos erros de medida são menores.

O expoente dinâmico DB é coerente com seu valor exato em $d = 2$, $z = 3/2$ (Fig. 2.14). Em $d = 3$, $1.605 \leq z \leq 1.64$ [27].

Capítulo 3

Equações de Crescimento

O problema do enrugamento dinâmico pode ser abordado analiticamente, mesmo em modelos discretos sem solução exata, se se puder descrever a evolução temporal da altura $h(\mathbf{x}, t)$ por meio de uma *equação de crescimento*. Isto é possível nas grandes escalas de comprimento e de tempo, em que h é uma função contínua dos seus argumentos. A idéia é encontrar uma equação diferencial estocástica cuja solução $h(\mathbf{x}, t)$ tenha as mesmas médias estatísticas do modelo de crescimento, com as mesmas propriedades e expoentes de escala (para a rugosidade, por exemplo), e que seja a mais simples possível.

As equações de crescimento podem ser derivadas por uma quantidade de formas diferentes, como a análise das simetrias do modelo [4, 29], pela passagem ao limite da equação mestra do processo microscópico de deposição [30, 31, 32, 33, 34], ou tomando pequenos desvios de interfaces em equilíbrio como ponto de partida [11].

Neste capítulo, apresentamos a equação de crescimento para a deposição aleatória. Em seguida, apresentamos o modelo de *deposição aleatória com relaxação de superfície* (DAR), no contexto da aproximação linear para as flutuações de altura, e a equação de crescimento para DAR e DB, com algumas expressões e resultados exatos em $d = 2$. No fim do capítulo, revisamos algumas tentativas recentes de associar equações de crescimento e modelos discretos, através da abordagem da equação mestra.

3.1 Equação de Crescimento para DA

Em geral, o crescimento da altura em cada sítio pode ser descrito pela equação

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \Phi(\mathbf{x}, t),$$

onde Φ é o número de partículas chegando ao sítio \mathbf{x} por unidade de tempo. Como o sítio de deposição é escolhido aleatoriamente em cada instante, decomponemos Φ em duas partes:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = F + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (3.1)$$

onde $F = \delta h / L^{d-1}$ é o fluxo médio de partículas em cada sítio multiplicado pelo incremento de altura δh (unitário), e $\eta(\mathbf{x}, t)$ é um desvio do fluxo médio; η é um ruído aleatório que deve atender

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0, \quad (3.2)$$

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (3.3)$$

e reflete a natureza estocástica das flutuações de altura. A Eq. 3.3 reflete a ausência de correlações no espaço e no tempo, uma vez que a média configuracional do produto $\eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t')$ resulta zero, exceto quando $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ e $t = t'$ [4].

Da Eq. 3.1 podemos calcular as médias

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

$$\langle h^2(\mathbf{x}, t) \rangle = (Ft)^2 + 2Dt,$$

donde

$$W^2 = 2Dt.$$

Os termos da Eq. 3.1 foram obtidos a partir dos principais ingredientes da regra de agregação da deposição aleatória, e a sua solução $h(\mathbf{x}, t)$ reproduz o resultado exato obtido na Sec. 2.3 (comportamento de escala $W \sim t^\beta$, $\beta = 1/2$) e contém Nesse sentido, a Eq. 3.1 é a equação de crescimento que descreve o modelo DA.

O modelo DA ilustra alguns dos principais passos para a obtenção heurística de uma equação de crescimento, não obstante a simplicidade da regra microscópica de agregação. Em geral, em um modelo de deposição correlacionado (como o modelo DB), o incremento δh pode depender de t e \mathbf{x} e suas vizinhanças de forma não trivial, e encontrar, ou mesmo solucionar a equação de crescimento pode não ser uma tarefa simples.

As idéias introduzidas nesta secção também formam o contexto adequado para definir *classes de universalidade*. Uma classe de universalidade de enrugamento de interface é um conjunto de simetrias e expoentes críticos comuns a diferentes modelos de crescimento que atendem à hipótese de escala dinâmica (Eq. 2.7). Modelos na mesma classe de universalidade têm a mesma equação de crescimento, em que não figuram detalhes microscópicos dos modelos, mas apenas suas características principais [4]. A Eq. 3.1 define uma classe de universalidade muito particular, em que a interface não desenvolve correlações (e a Eq. 2.7 não se aplica), e W sempre cresce com $\beta = 1/2$. O modelo DA é seu protótipo mais simples, e dá nome à *classe de universalidade da deposição aleatória*.

3.2 Desvios do Equilíbrio e Enrugamento

Vamos abordar o enrugamento dinâmico considerando inicialmente a interface que separa duas fases em um sistema termodinâmico em equilíbrio. A interface corresponde à região no espaço em que o parâmetro de ordem varia rapidamente. Se o sistema sofre pequenas flutuação em torno do equilíbrio, a dinâmica de relaxação do parâmetro de ordem pode ser descrita, no espírito da teoria de Landau, pela equação [10, 11]

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F[\psi(\mathbf{r}, t)]}{\delta \psi} \quad (3.4)$$

Esta é uma equação para todo o espaço, onde a taxa de relaxação do parâmetro de ordem ψ a baixas temperaturas depende da minimização da energia livre¹ F . Assumimos que a constante Γ não depende de ψ , \mathbf{r} , t , mas depende de alguma forma da temperatura. A energia livre é dada por [10]

$$F[\psi] = \int d^d r \left(\frac{c}{2} (\nabla \psi)^2 + f(\psi) + H\psi \right),$$

onde f é a energia livre por unidade de volume e $H\psi$ é a contribuição do campo aplicado H à energia. A Eq. 3.4 depende da escolha que faremos para f .

No equilíbrio, o parâmetro de ordem assume seu valor independente do tempo ψ_0 . Caracterizamos os estados de equilíbrio $\delta F[\psi]/\delta \psi = 0$ por uma interface plana, com largura de difusão do parâmetro de ordem finita e uniforme, localizada em torno de, digamos, $y = 0$. Isto requer $H = 0$, e, nessas condições, a condição de equilíbrio fornece

$$-c \frac{d^2 \psi_0(y)}{dy^2} + \frac{\partial f}{\partial \psi_0} = 0. \quad (3.5)$$

¹A expressão “energia livre” é usada livremente para referir-se ao funcional de Landau, embora F não seja um potencial termodinâmico no sentido estrito [10].

A amplitude e a largura de difusão do parâmetro de ordem, no equilíbrio, são fixadas pela tensão superficial

$$\sigma = c \int dy \left(\frac{d\psi_0}{dy} \right)^2. \quad (3.6)$$

Se a largura de difusão é suficientemente pequena, $\psi_0(y) \sim \theta(y)$, onde θ é a função degrau.

Fora do equilíbrio, a interface é rugosa, e dependente do tempo. Grossmann, Guo e Grant [11] supõem que a interface se localiza em torno de $u = 0$, onde $u(\mathbf{r}, t)$ é uma função auxiliar. A normal em qualquer ponto da interface é dada por

$$\mathbf{n} = \ell \nabla u,$$

onde $\ell = |\nabla u|^{-1}$. Admitimos que u é suave, e aproximamos [11]

$$\psi(\mathbf{r}, t) \sim \psi_0(u(\mathbf{r}, t)). \quad (3.7)$$

Com a Eq. 3.7, a Eq. 3.4 fica

$$\frac{\partial u}{\partial t} \frac{d\psi_0(u)}{du} = -\Gamma \left(H - c \nabla^2 \psi_0(u) + \frac{\partial f}{\partial \psi_0} \right). \quad (3.8)$$

Por consistência com a aproximação na Eq. 3.7, $\partial f / \partial \psi_0$ é dado pelo seu valor de equilíbrio, Eq. 3.5 (onde $H = 0$). Isto equivale a ignorar as contribuições da deformação sob tensão superficial à energia livre total F . Substituindo Eq. 3.5 na Eq. 3.8:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \frac{d\psi_0(u)}{du} = -\Gamma \left(H - c \nabla^2 \psi_0(u) + c \frac{d^2 \psi_0}{dn^2} \right), \quad (3.9)$$

onde d/dn é a derivada direcional na direção \mathbf{n} . Expandindo o laplaciano e a derivada direcional na Eq. 3.9, obtemos

$$\frac{\partial u}{\partial t} \frac{d\psi_0(u)}{du} = -\Gamma \left(H + \frac{cK}{\ell} \frac{d\psi_0}{du} \right), \quad (3.10)$$

onde $K = -\nabla \cdot \mathbf{n}$ é a *curvatura* da interface.

Projetamos a Eq. 3.10 sobre $u = 0$ aplicando

$$\langle P | = \frac{1}{\delta\psi_0} \int \ell du \frac{d\psi_0}{\ell du},$$

com $\delta\psi_0$ constante, e obtemos

$$v_n = \lambda + \nu K, \quad (3.11)$$

onde $v_n = -\ell du / dt$ é a velocidade normal à interface ($\ell du = |d\mathbf{r}|$ é o deslocamento infinitesimal quando $d\mathbf{r} \parallel \mathbf{n}$),

$$\lambda = \frac{\nu H}{\sigma} \delta\psi_0$$

e

$$\nu = \Gamma c.$$

A dinâmica do parâmetro de ordem não é de relaxação pura, no entanto [11, 25]. Para modelar as flutuações térmicas, adicionamos um *ruído gaussiano* $\eta(\mathbf{x}, t)$ no lado direito da Eq. 3.11,

$$v_n = \lambda + \nu K + \eta. \quad (3.12)$$

O ruído satisfaz as Eqs. 3.2, 3.3, com $D \rightarrow \Gamma$.

Assim, λ é a velocidade da interface em resposta ao campo aplicado H , e ν é uma constante positiva, de forma que as flutuações espontâneas de altura se dêem sempre no sentido de reduzir a curvatura, e restaurar a condição de equilíbrio. Se $\lambda = 0$, a interface está, em média, em repouso.

Consideramos então uma interface suave e livre de bolhas da forma $u = y - h(\mathbf{x}, t)$. Escrevendo a expressão explícita da curvatura K em $d = 2$:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \ell^{-1} \left(\lambda + \nu \ell^3 \nabla^2 h + \eta(\mathbf{x}, t) \right),$$

onde $\ell^{-2} = 1 + (\nabla h)^2$. Se $|\nabla h| \ll 1$, podemos expandir ℓ em potências de $(\nabla h)^2$; os primeiros termos são

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

O movimento uniforme gerado pelo termo λ não afeta as propriedades de escala da interface [4], ie. o sistema físico não se altera por mudanças de coordenadas entre referenciais inerciais. Operando a mudança de variáveis $h \rightarrow h + \lambda t$ (referencial solidário com o movimento médio da interface), obtemos a forma mais conveniente

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \dots + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (3.13)$$

Equações tipo-Langevin com esta forma podem descrever pequenas flutuações de uma superfície se movendo sob ação de campo externo (H), como a interface entre uma fase sólida crescendo (lentamente) sobre um volume de líquido super-resfriado (o campo externo, nesse caso, é o gradiente de potencial químico), ou a interface globalmente plana entre duas fases de magnetização de spins [11]. A próxima secção trata da aproximação mais simples para a Eq. 3.13, em que a expansão de ℓ em potências de $(\nabla h)^2$ é truncada no primeiro termo, e a equação resultante é *linear*. A aproximação linear é tratável analiticamente, e tem as mesmas propriedades de escala da Eq. 2.7. Na Sec. seguinte, estudamos o efeito do termo não-linear $(\nabla h)^2$ sobre as propriedades de escala da teoria linear.

3.3 Teoria Linear

A equação mais simples que descreve as flutuações de uma interface em equilíbrio é

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (3.14)$$

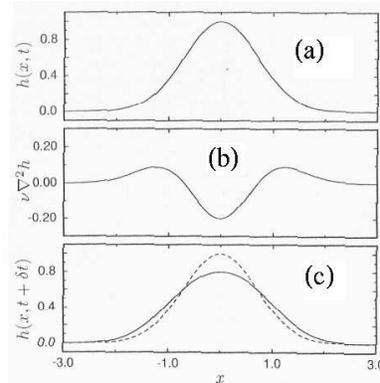
e é chamada equação de Edwards-Wilkinson (EW) [35].

O termo $\nabla^2 h$ contribui para a suavização da interface pela “redistribuição” da altura nos pontos onde a curvatura é alta, no sentido de reduzir a curvatura, mas sem alterar a altura média, de vez que

$$v \equiv \int d^{d-1}x \left\langle \frac{\partial h}{\partial t} \right\rangle = 0,$$

devido a condições periódicas de contorno [4], ie. a altura média permanece em equilíbrio. O laplaciano age sobre $h(\mathbf{x}, t)$ como um mecanismo *conservativo* de relaxação de superfície (Fig. 3.1); por isso, ν é chamado genericamente de *tensão superficial*.

Figura 3.1: Efeitos da tensão superficial sobre $h(\mathbf{x}, t)$. Considere uma flutuação de altura com o perfil mostrado em (a); em (b), mostramos a contribuição $\nu \nabla^2 h$ correspondente à taxa de variação da altura e, em (c), o perfil resultante num instante posterior. O efeito do termo laplaciano é o de reduzir a altura do ponto mais alto e redistribuí-la pelos lados do perfil, conservando a “massa” (área sob a curva, em $d = 2$). Extraído de [4].



A Eq. 3.14 é linear, e pode ser solucionada analiticamente [36, 25]. A solução $h(\mathbf{x}, t)$ da Eq. EW exhibe as mesmas propriedades de escala do modelo DB, e também atende à Eq. 2.7, com expoentes diferentes, definindo uma nova classe de universalidade de enrugamento dinâmico, *classe EW*.

3.3.1 Solução por Scaling

Podemos determinar os expoentes de escala da Eq. EW sem passar pela solução completa, simplesmente fazendo a hipótese ad hoc de que $h(\mathbf{x}, t)$ atende Eq. 2.7. Se a interface é auto-afim, $h(\mathbf{x}, t)$ deve ser estatisticamente indistinguível de si mesma sob as transformações de escala

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = b\mathbf{x}$$

$$t \rightarrow t' = b^z t$$

$$h \rightarrow h' = b^\alpha h,$$

que, substituídos na Eq. 3.14, resultam [4]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu b^{z-2} \nabla^2 h + b^{z/2-(d-1)/2-\alpha} \eta(\mathbf{x}, t).$$

Exigindo que a Eq. 3.14 seja invariante sob essas transformações, obtemos os expoentes da classe EW

$$\alpha = \frac{3-d}{2},$$

$$\beta = \frac{3-d}{4},$$

$$z = 2,$$

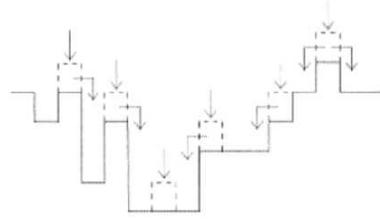
Para $d > 3$, o expoente de rugosidade é *negativo*. A solução exata mostra que, nessa dimensionalidade, existe uma interface-limite com rugosidade $W^2 \sim a^{z-d+1}$, onde a é o parâmetro de rede na direção paralela ao substrato; isto significa que as flutuações de altura geradas pelo ruído não são capazes de superar a barreira da tensão superficial, e a interface é assintoticamente plana [25, 4].

3.4 Deposição Aleatória com Relaxação de Superfície (DAR)

Introduzimos nesta secção um modelo que apresenta mecanismos de suavização da interface análogos aos da Eq. EW. No modelo de deposição aleatória com relaxação de superfície (DAR), um sítio \mathbf{x} do substrato é escolhido aleatoriamente, e as alturas em \mathbf{x} e nos primeiros vizinhos \mathbf{x}'_j , computadas. Então, um sítio \mathbf{z} dentre $\mathbf{x}, \mathbf{x}'_j$ é escolhido tal que $h(\mathbf{z}, t) = \min\{h(\mathbf{x}, t), h(\mathbf{x}'_j, t)\}$, e sua altura, incrementada de uma unidade. Isto equivale a depositar as partículas segundo a regra da deposição aleatória, mas permitir que as partículas “relaxem” para um sítio de menor altura no raio da primeira vizinhança (Fig. 3.2). As partículas “comparam” as alturas do sítios \mathbf{x} e \mathbf{x}'_j antes de “decidir” onde se agregar, o que cria *correlações* entre sítios vizinhos. O comprimento de correlação lateral $\xi_{||}$ cresce à medida que mais partículas são depositadas, o que eventualmente leva à saturação da rugosidade [4].

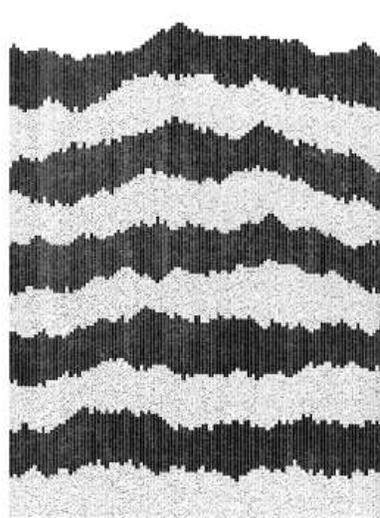
O modelo DAR não tem solução exata (uma derivação da equação de crescimento a partir das regras microscópicas de agregação é apresentada no fim deste capítulo, contudo). Simulações numéricas em $d = 2$ e $d = 3$ mostram que os expoentes DAR são muito próximos daqueles obtidos da Eq. EW [37, 28]. A

Figura 3.2: No modelo DAR, as partículas depositadas segundo a regra DA podem “relaxar” para os sítios vizinhos de menor altura. A relaxação de superfície cria correlações entre vizinhos e, eventualmente, leva à saturação da rugosidade. Extraído de [4].



similaridade entre o mecanismo de relaxação de superfície e a redistribuição de “massa” do termo de tensão superficial na Eq. 3.14 remete o modelo DAR e a Eq. EW à mesma classe de universalidade [4].

Figura 3.3: Depósito DAR em $d = 2$ obtido pela deposição de 35000 partículas, em um substrato de tamanho $L = 100$. Cada camada, identificada pelos tons claro e escuro, indica a deposição de 3500 partículas. O depósito DAR é compacto, e a interface é mais suave que a obtida por DB (Fig. 2.2). Extraído de [4].



3.5 Teoria Não-Linear

Se a expansão na Eq. 3.13 for levada até o primeiro termo não-linear, obtemos

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (3.15)$$

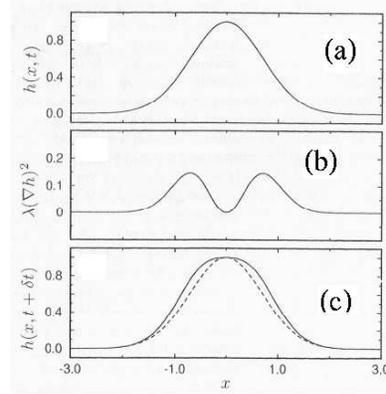
A Eq. 3.15, introduzida por Kardar, Parisi e Zhang [38] como modelo de crescimento para interfaces com mecanismos de *crescimento lateral*, é chamada equação KPZ. O primeiro termo da Eq. KPZ é o de tensão superficial, e dá conta da redistribuição conservativa das alturas. O termo não-linear também age no sentido da redução da curvatura, mas dá uma contribuição não-nula para a velocidade média da interface (cf. mudança entre referenciais inerciais

na passagem que precede a Eq. 3.13):

$$v = \frac{\lambda}{2} \int d^{d-1}x \langle (\nabla h)^2 \rangle = v_e$$

a não ser que a interface seja plana, com $h = \text{constante}$ (nesse caso, $v_e = 0$). O termo $(\nabla h)^2$, também chamado *termo cinético*, atua como um mecanismo *não-conservativo* de redistribuição da altura, porque suaviza a interface *adicionando* “massa” (Fig. 3.4), e a interface se move sob ação de um campo local. A taxa v_e devido à presença do termo não-linear é chamada *excesso de velocidade*.

Figura 3.4: Efeitos do termo não-linear sobre $h(x, t)$. Considere uma flutuação de altura com o perfil em (a); em (b), mostramos a contribuição do termo $(\lambda/2)(\nabla h)^2$ à $\partial h/\partial t$ em x e, em (c), o perfil resultante num instante posterior. O efeito do termo $(\nabla h)^2$ é o de reduzir a curvatura adicionando “massa” aos lados do perfil, gerando excesso de velocidade. Extraído de [4].



Espera-se que a solução da Eq. KPZ seja uma interface auto-afim [25], mas com expoentes diferentes dos previstos pela teoria linear. É possível testar a estabilidade dos expoentes da classe EW sob a inclusão da não-linearidade $(\nabla h)^2$ através de *power counting* [25], da seguinte forma: inicialmente operamos as transformações

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &\rightarrow \mathbf{x}' = b\mathbf{x}, \\ t &\rightarrow t' = b^z t, \\ h &\rightarrow h' = b^\alpha h. \end{aligned}$$

Se $b > 1$, essas transformações refletem um *aumento de escala* e, para $b \rightarrow \infty$, o comportamento assintótico dos vários termos da Eq. KPZ dão uma medida da sua relevância para $h(\mathbf{x}, t)$ nas grandes escalas de comprimento. Os coeficientes na nova escala são

$$\begin{aligned} \tilde{\nu} &= b^{z-2}\nu, \\ \tilde{D} &= b^{z-d+1-2\alpha}D, \\ \tilde{\lambda} &= b^{z+\alpha-2}\lambda. \end{aligned}$$

Se fizermos os expoentes α, z iguais aos da teoria linear, ν, D permanecem invariantes, mas λ diverge, para $d < 3$, como b^α , indicando que o termo cinético é *relevante*, e possivelmente altera os expoentes da teoria linear [25, 39]

3.5.1 Invariância Galileana

A Eq. KPZ tem uma importante simetria, que deve ser considerada na solução por scaling, para que se obtenha os expoentes corretos [25, 4]. A Eq. KPZ pode ser mapeada na *equação de Burgers* para o campo de velocidades $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ de um fluido através da transformação [25, 40, 39]

$$\nabla h \rightarrow -\mathbf{v}.$$

A Eq. de Burgers [39],

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \lambda \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \nabla \eta(\mathbf{x}, t), \quad (3.16)$$

foi introduzida no contexto do fluxo turbulento de um fluido livre de vorticidade ($\nabla \times \mathbf{v} = 0$) [40, 39], e a invariância sob uma transformação de Galileu

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{v}(\mathbf{x} - \lambda \mathbf{v}_0 t, t) + \mathbf{v}_0,$$

é uma simetria exata sua. A invariância galileana da Eq. de Burgers corresponde a invariância da Eq. KPZ sob o “tilt” [39]

$$h(\mathbf{x}, t) \rightarrow h(\mathbf{x} - \lambda \mathbf{v}_0 t, t) - \mathbf{v}_0 \mathbf{x} + \frac{\lambda}{2} v_0^2 t,$$

com a mesma “velocidade relativa” $\lambda \mathbf{v}_0$ entre referenciais. Como a invariância de Galileu vem das leis de Newton, deve valer em todas as escalas com a mesma velocidade relativa, donde concluímos que λ é um *invariante de escala*.

3.5.2 Solução por Scaling

Aplicando as transformações de escala

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = b\mathbf{x}$$

$$t \rightarrow t' = b^z t$$

$$h \rightarrow h' = b^\alpha h$$

à Eq. KPZ, obtemos

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu b^{z-2} \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} b^{\alpha+z-2} (\nabla h)^2 + b^{(d-1)/2+z/2-\alpha} \eta(\mathbf{x}, t).$$

Da invariância galileana, obtemos a simetria exata

$$\alpha + z = 2 \quad (3.17)$$

da Eq. KPZ em qualquer dimensão. Pela solução por métodos de grupo de renormalização, o fluxo dos coeficientes ν , λ e D da Eq. KPZ em d dimensões no espaço de parâmetros é dado pelas equações [38, 39, 4]

$$\frac{d\nu}{db} = \nu[z - 2 + G(3 - d)], \quad (3.18)$$

$$\frac{d\lambda}{db} = \lambda(z - 2 + \alpha) \quad (3.19)$$

e

$$\frac{dD}{db} = D[z - 2\alpha + (d + 1)(G - 1)], \quad (3.20)$$

(onde b é um parâmetro de escala) e acoplam os coeficientes ν , λ e D por meio da constante $G \sim \lambda^2 D / \nu^3$. No ponto fixo $d\nu/db = d\lambda/db = dD/db = 0$, a Eq. 3.17 é obtida imediatamente da Eq. 3.19. Contudo, ν, D não renormalizam independentemente, a não ser que $\lambda = 0$ (Eq. EW), quando os expoentes de ponto fixo têm os valores previstos pela teoria linear (Sec. 3.3.1). Isto não permite simplesmente assumir que os coeficientes do termo laplaciano e do ruído sejam invariantes, para obter z para qualquer d . Em $d = 2$, todavia, um invariante de escala formado pela razão de D/ν é conhecido [4, 40]. Daí obtemos os expoentes KPZ exatos em $d = 2$: $\alpha = 1/2$, $z = 3/2$ e $\beta = 1/3$ [38].

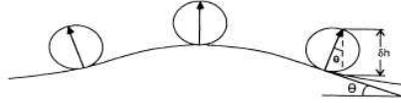
3.6 DB e a Equação KPZ

Na deposição balística, a agregação ao primeiro contato gera crescimento na direção normal *local* à interface (partícula A na Fig. 2.1), ie. nos pontos de inclinação elevada, a interface pode crescer *lateralmente* [38, 39]. Por uma construção geométrica simples, o deslocamento incremental da interface projetado sobre o eixo de alturas contribui para $\partial h / \partial t$ com uma taxa (Fig. 3.5)

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v_n [1 + (\nabla h)^2]^{1/2} \approx v_n + \frac{v_n}{2} (\nabla h)^2 + \dots$$

onde v_n é a velocidade de crescimento na direção normal à interface. Adicionando

Figura 3.5: Origem do termo não-linear na Eq. KPZ. Descrever interfaces que apresentam mecanismos de crescimento lateral foi a motivação original da adição do termo $(\nabla h)^2$ ao termo de tensão superficial na equação de crescimento [38]. Extraído de [39].



os termos de tensão superficial e ruído, e mudando para o referencial solidário com a interface, $h \rightarrow h + v_n$, recuperamos a Eq. 3.15.

Simulações numéricas e métodos de grupo de renormalização perturbativos em $d = 2$ [38] mostram que os expoentes da deposição balística obtidos numericamente [28, 27] são muito próximos daqueles obtidos para a Eq. KPZ, e remetem o modelo DB e a Eq. KPZ à mesma classe de universalidade. Métodos perturbativos *falham* em determinar expoentes ou dimensão crítica em $d \geq 3$ [4, 38, 39], mas simulações numéricas mostram acordo entre os expoentes DB e KPZ em $d = 3$ [41]. A classe de universalidade da Eq. KPZ é usualmente chamada *classe KPZ*.

3.7 Processo Microscópico e Equação de Crescimento

Nos modelos de deposição irreversível estudados até o momento, é possível caracterizar um estado do depósito pela configuração do perfil de alturas $\mathbf{H} = \{h_i\}$, onde $h_i = h(\mathbf{x}_i, t)$, e associar uma probabilidade $P(\mathbf{H}, t)$ à configuração \mathbf{H} no instante t [31]. O processo de deposição é markoviano, e $P(\mathbf{H}, t)$ só deve depender da configuração no instante $t - \delta t$, e das taxas de transição entre estados do perfil de alturas, através de uma equação mestra do tipo nascimento-morte

$$\frac{\partial P(\mathbf{H}, t)}{\partial t} = \sum_{\mathbf{H}'} P(\mathbf{H}', t) W(\mathbf{H}', \mathbf{H}) - \sum_{\mathbf{H}'} P(\mathbf{H}, t) W(\mathbf{H}, \mathbf{H}'), \quad (3.21)$$

onde $\sum_{\mathbf{H}}$ denota uma soma múltipla sobre todas as possíveis alturas em todos os sítios da rede, e $W(\mathbf{H}, \mathbf{H}')$ é a taxa da transição $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}'$ em δt .

Um teorema devido a Kurtz [43, 44, 45] enuncia que este problema é completamente equivalente à equação estocástica²

$$\frac{dh_i}{dt} = K_i^{(1)} + \eta_i, \quad (3.22)$$

onde i indexa um sítio do substrato, $K_i^{(1)}$ é o primeiro momento da taxa de transição e η_i é um ruído com média zero e covariância

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = K_{ij}^{(2)} \delta(t - t'), \quad (3.23)$$

onde $K_{ij}^{(2)}$ é o segundo momento da taxa de transição. Os momentos $K_i^{(1)}$, $K_{ij}^{(2)}$ são definidos por

$$K_i^{(1)} = \sum_{\mathbf{H}'} (h'_i - h_i) W(\mathbf{H}, \mathbf{H}'), \quad (3.24)$$

$$K_{ij}^{(2)} = \sum_{\mathbf{H}'} (h'_i - h_i)(h'_j - h_j) W(\mathbf{H}, \mathbf{H}'). \quad (3.25)$$

²V. também Ref. [42], Sec. 5.8.

Os únicos termos diferentes de zero nas Eqs. 3.24, 3.25 são aqueles em que uma partícula é depositada no sítio \mathbf{x}_i entre $t - \delta t$ e t . Para cada par de configurações \mathbf{H}' em t e \mathbf{H} em $t - \delta t$ que diferem apenas pela altura do sítio \mathbf{x}_i , a soma se dá sobre o número de maneiras pelas quais h_i é incrementada. Escrevemos a soma em termos das probabilidades $w_j^{(k)}(\mathbf{H}, \mathbf{H}')$ com que uma partícula incidente em \mathbf{x}_j é depositada em \mathbf{x}_i no intervalo δt . O superíndice k enumera as transições possíveis para *uma partícula*. Para o modelo DAR em $d = 2$, por exemplo, k expressa as condições para que a partícula se agregue ao sítio de incidência ($k = 1$), relaxe para o sítio \mathbf{x}_{j-1} ($k = 2$) ou relaxe para o sítio \mathbf{x}_{j+1} ($k = 3$), se o escopo das transições for o da primeira vizinhança. A soma se dá então sobre os índices k, j .

As probabilidades de deposição de partícula simples são funções discretas no espaço e das diferenças de altura. Por exemplo, considere novamente o modelo DAR em $d = 2$, e a probabilidade $w_i^{(1)}$ de que uma partícula incidente em \mathbf{x}_i permaneça no lugar. Sabemos que a probabilidade de permanência em \mathbf{x}_i só é diferente de zero se $h_i \leq h_{i-1}$ e $h_i \leq h_{i+1}$, e expressamos $w_i^{(1)}$ por

$$w_i^{(1)} = \theta(H_i^{i+1})\theta(H_i^{i-1}), \quad (3.26)$$

onde $\theta(x)$ é a *função degrau*, definida por

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \geq 0 \\ 0 & \text{se } x < 0 \end{cases}$$

e

$$H_j^i \equiv h_i - h_j$$

é a diferença (adimensional) de alturas entre os sítios \mathbf{x}_i e \mathbf{x}_j no instante t . As taxas $w_i^{(k)}$ devem atender a

$$w_i^{(1)} + w_i^{(2)} + w_i^{(3)} = 1,$$

o que apenas expressa que a condição de que a partícula incidente no sítio \mathbf{x}_i só pode ser depositada nos sítios $\mathbf{x}_{i\pm 1}$ ou permanecer no lugar, e garante que a taxa de deposição seja constante e igual a $1/\delta t$ em qualquer sítio.

Os passos seguintes na obtenção de equações contínuas de crescimento são ilustrados para DB e DAR na secção a seguir.

3.7.1 DAR e DB e Equações de Crescimento

Na *deposição aleatória com relaxação de superfície*, a deposição de uma partícula no sítio \mathbf{x}_i sempre *incrementa* a altura h_i de uma unidade. Em $d = 2$ [32]:

$$K_i^{(1)} = \frac{a_{\perp}}{\delta t} [w_i^{(1)} + w_{i+1}^{(2)} + w_{i-1}^{(3)}], \quad (3.27)$$

onde a_\perp é o incremento unitário de altura,

$$w_i^{(2)} = \theta(H_i^{i+1})[1 - \theta(H_i^{i-1})] + \frac{1}{2}[1 - \theta(H_i^{i+1})][1 - \theta(H_i^{i-1})], \quad (3.28)$$

$$w_i^{(3)} = \theta(H_i^{i-1})[1 - \theta(H_i^{i+1})] + \frac{1}{2}[1 - \theta(H_i^{i+1})][1 - \theta(H_i^{i-1})], \quad (3.29)$$

e $w_i^{(1)}$ é dado pela Eq. 3.26.

Admitindo que o perfil de alturas possa ser interpolado por uma função $h(\mathbf{x}, t)$, onde \mathbf{x} é uma variável contínua, podemos escrever a diferença adimensional de alturas como [34]

$$H_{i+m}^{i+l} = (l - m) \frac{a_\parallel}{a_\perp} \frac{\partial h(x_i)}{\partial x} + (l^2 - m^2) \frac{a_\parallel^2}{2a_\perp} \frac{\partial^2 h(x_i)}{\partial x^2} + O\left(a_\parallel^3/a_\perp\right), \quad (3.30)$$

onde a_\parallel é o parâmetro de rede na direção paralela ao substrato. Admitindo ainda que a função degrau possa ser aproximada por uma função analítica adequada, eg. uma função tangente hiperbólica [31], podemos expandí-la em uma série de potências do seu argumento, retendo apenas o termo linear:

$$\theta(x) \approx c_0 + c_1 x. \quad (3.31)$$

Substituindo Eq. 3.30 em 3.27, e expandindo $\theta(x)$ como na Eq. 3.31, a Eq. 3.22 para o modelo DAR recupera a Eq. EW,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F + \nu \nabla^2 h + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (3.32)$$

com coeficientes

$$F = \frac{a_\perp}{\delta t},$$

$$\nu = 2 \frac{c_1 a_\parallel^2}{\delta t}.$$

Como \mathbf{H} em t e \mathbf{H}' em $t - \delta t$ só diferem pela altura no sítio \mathbf{x}_i onde a partícula é depositada, $K_{ij}^{(2)}$ é *diagonal*, e proporcional ao primeiro momento da taxa de transição [34]:

$$K_{ij}^{(2)} = a_\perp K_i^{(1)} \delta_{ij}.$$

Da Eq. 3.23, a covariância do ruído resulta

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = 2D \delta(x - x') \delta(t - t'),$$

com coeficiente

$$D = \frac{a_\perp}{2} F + O\left(a_\perp a_\parallel^2\right). \quad (3.33)$$

Na *deposição balística*, a deposição sempre se dá no sítio de incidência, \mathbf{x}_i , mas o incremento de altura depende do estado dos primeiros vizinhos $\mathbf{x}_{i\pm 1}$. As regras para o modelo DB são resumidas por

$$K_i^{(1)} = \frac{a_\perp}{\delta t} [w_i^{(1)} + H_i^{i-1} w_i^{(2)} + H_i^{i+1} w_i^{(3)}], \quad (3.34)$$

onde a_\perp é o incremento unitário de altura,

$$w_i^{(1)} = \theta(H_{i+1}^i)\theta(H_{i-1}^i) \quad (3.35)$$

é a taxa com que a altura do sítio \mathbf{x}_i é incrementada de uma unidade,

$$w_i^{(2)} = [1 - \theta(H_{i-1}^i)][1 - \theta(H_{i-1}^{i+1})] + \frac{1}{2}\delta(H_{i-1}^{i+1}, 0)[1 - \theta(H_{i+1}^i)] \quad (3.36)$$

é a taxa com que a altura do sítio \mathbf{x}_i é igualada à do sítio \mathbf{x}_{i-1} (por agregação de uma partícula do tipo A , cf. Fig. 2.1) e

$$w_i^{(3)} = [1 - \theta(H_{i+1}^i)][1 - \theta(H_{i+1}^{i-1})] + \frac{1}{2}\delta(H_{i-1}^{i+1}, 0)[1 - \theta(H_{i-1}^i)] \quad (3.37)$$

é a taxa com que a altura do sítio \mathbf{x}_i é igualada à do sítio \mathbf{x}_{i+1} , onde $\delta(x, 0) = \theta(x) + \theta(-x) - 1$ é a função *delta de Kroenecker*. Note a diferença entre a Eq. 3.26, onde se expressa que a condição de permanência é a de que o sítio de incidência seja um *mínimo local* (ou um *platô*) do perfil de alturas, e a Eq. 3.35, em que a condição de agregação de uma partícula do tipo B (Fig. 2.1) é a de que o sítio de incidência seja um *máximo local*.

Repetindo os passos que levaram à Eq. 3.32, recuperamos a Eq. KPZ,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F + \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (3.38)$$

com os coeficientes

$$\begin{aligned} F &= \frac{a_\perp}{\delta t} c_0^2, \\ \nu &= \frac{a_\parallel^2}{2\delta t} (1 - c_0 - 2c_0c_1), \\ \lambda &= 2 \frac{a_\parallel^2}{a_\perp \delta t} c_1 (5 - 4c_0 - c_1) \end{aligned}$$

e D dado pela Eq. 3.33.

O método de regularização escolhido para obter as Eqs. 3.32 e 3.38 foi o mesmo usado em Ref. [47], e é bastante simplificado, se comparado com o trabalho de outros autores em estabelecer conexões entre modelos discretos e equações contínuas [32, 48, 49, 50, 51], embora ilustre todos os passos na derivação de uma equação contínua de crescimento a partir das regras microscópicas de agregação. O procedimento geral é sensível à representação das funções degrau e δ de Kroenecker escolhida [30], e depende de uma expansão não-rigorosa dessas funções não analíticas em série de potências. Mesmo assim, a derivação das Eqs. EW e KPZ foi levada a efeito para DAR e DB com bom acordo em $d = 2$ [32, 46]. A associação da Eq. KPZ com a deposição balística ainda é controversa [30], mas a equação regularizada obtida em Ref. [46] nessa dimensionalidade tem a Eq. KPZ como limite.

Capítulo 4

Modelos de Crescimento Competitivos

Descrever em maior detalhe processos reais de crescimento de filmes por meio de modelos discretos exige que se introduzam mecanismos de agregação que vão além dos modelos do tipo partícula simples, em que uma única “espécie” de partícula agrega-se de acordo com regras de ocupação invariáveis no espaço e no tempo, que caracterizam a “espécie”.

A formação de filmes policristalinos, por exemplo, enseja modelos em que duas ou mais regras de ocupação *competem*, com privilégios diferentes para cada uma em diferentes regiões do filme, de acordo com mecanismos de adsorção no corpo e na periferia da amostra, e diretamente sobre o substrato, por exemplo [4, 52]. *Modelos competitivos de crescimento* ainda podem ser motivados por experimentos de deposição de misturas entre espécies diferentes, em que o filme pode passar por mudanças na dinâmica de crescimento e na morfologia, e transições de enrugamento da superfície, se comparado com a deposição isolada de uma das espécies [53, 54, 55, 56].

Este capítulo se inicia pela introdução de dois modelos competitivos formados a partir dos três modelos de crescimento estudados até aqui. As seções que se seguem prestam-se a apresentar alguns resultados numéricos e a formular uma *hipótese de escala* apropriada para a rugosidade, e a derivar as equações de crescimento para esses modelos. Na última seção, apresentamos o modelo de *deposição balística bidispersa*, que dá nome a este trabalho, e ao qual serão dispensados os capítulos seguintes.

4.1 Competição com Deposição Aleatória

Nos modelos DB e DAR, genericamente chamados *correlacionados*, o crescimento lateral e a relaxação de superfície são os mecanismos responsáveis por criar correlações que ulteriormente levam a rugosidade da interface à saturação. Para tempos abaixo do transiente t_0 , as colunas estão descorrelacionadas ($\xi_{\parallel} \approx 0$), e a rugosidade não escala (a interface não é auto-afim). Nesse regime, a rugosidade cresce como t^{β_0} , onde $\beta_0 = 1/2$ é o expoente de crescimento DA. O transiente t_0 é o tempo que o sistema leva para desenvolver as diferenças de altura até o ponto em que elas possam causar correlações entre colunas. A diferença de altura entre colunas vizinhas é o único parâmetro que cada partícula depositada “enxerga”, para “decidir” de que forma vai se agregar, e aumentar a altura do sítio escolhido ou dos seus vizinhos, e depende do modelo, não sendo um parâmetro universal. Após o transiente, a rugosidade cresce como

$$W \approx Ct^{\beta} \quad (4.1)$$

até um tempo característico t_{\times} ,

$$t_{\times} \approx BL^z, \quad (4.2)$$

após o que o comprimento de correlação atinge o tamanho finito do sistema, e a rugosidade satura como

$$W_{\text{sat}} \approx AL^{\alpha}; \quad (4.3)$$

A , B e C são *amplitudes de escala*, subentendidas nas Eqs. 2.4 a 2.5, e explicitamente escritas aqui. Os mecanismos que geram correlações não estão presentes no modelo DA, que é representado, nas grandes escalas de comprimento e tempo, pela Eq. 3.13 com coeficientes λ, ν nulos.

Nesse contexto, definimos a *competição* entre um modelo correlacionado e a deposição aleatória da seguinte maneira: em qualquer instante, uma partícula é depositada no substrato segundo as regras do modelo correlacionado com probabilidade p , e segundo as regras do modelo DA com probabilidade $1 - p$. Isto é feito simplesmente sorteando, antes de cada evento de deposição, um número aleatório m no intervalo $[0, M]$, e escolhendo as regras do modelo DA se $m > Mp$. Para qualquer $0 < p < 1$, o modelo deve ser capaz de criar correlações entre colunas vizinhas, pelos mesmos mecanismos do modelo correlacionado puro ($p = 1$), e deve pertencer à mesma classe de universalidade da componente correlacionada [57, 58]. No entanto, as *taxas* com que as diferenças de altura no modelo correlacionado puro crescem a partir do substrato plano e em máximos e mínimos locais da interface são afetados, se $p < 1$. Esta mudança altera t_0 e

as amplitudes de escala (Eqs. 4.4, 4.5 e 4.6). Se $p = 0$, o modelo competitivo assim definido pertence à classe de universalidade da deposição aleatória, e as amplitudes de escala A e B (Eqs. 4.4 e 4.5) não fazem sentido (os expoentes α e z não são definidos para DA [4]).

Nas Refs. [59, 60, 61] é feito um estudo numerico de modelos competitivos com a deposição aleatória definidos desta maneira, e verifica-se que as amplitudes A, B e C escalam com expoentes δ, γ e γ , para qualquer $p > 0$, como:

$$A \sim p^{-\delta}, \quad (4.4)$$

$$B \sim p^{-\gamma}, \quad (4.5)$$

e

$$C \sim p^{-\gamma}. \quad (4.6)$$

A Fig. 4.1 mostra gráficos de W versus t para a competição entre a deposição aleatória com relaxação de superfície e a deposição aleatória (DAR-DA); a Fig. 4.2 mostra gráficos de W versus t para a competição entre a deposição balística e a deposição aleatória (DB-DA). A rugosidade forma famílias de curvas com dois parâmetros livres, L e p , e cada uma das figuras mostra o comportamento de uma família com um desses parâmetros fixo. Esses gráficos são típicos da competição com a deposição aleatória; por eles, é possível ver como valores igualmente espaçados de W_{sat} para diferentes valores de p com L fixo (L com p fixo) variando como potências de 2 no plano log-log sugerem imediatamente uma dependência de W_{sat} em p (L) do tipo lei de potência (Eqs. 4.3 e 4.4).

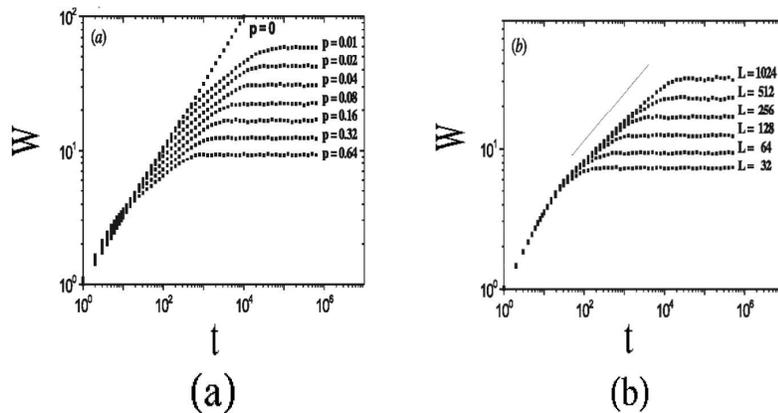


Figura 4.1: Gráficos W versus t para DAR-DA em $d = 2$. Em (a), $L = 256$ é fixado, e p varia como $p = 2^i/100$, com $i = 0, \dots, 6$; em (b), $p = 0.16$ é fixado, e L varia como $L = 2^j$, com $j = 5, \dots, 10$. Extraído de [59]. A reta mostrada em (b) tem coeficiente angular $\beta = 1/4$.

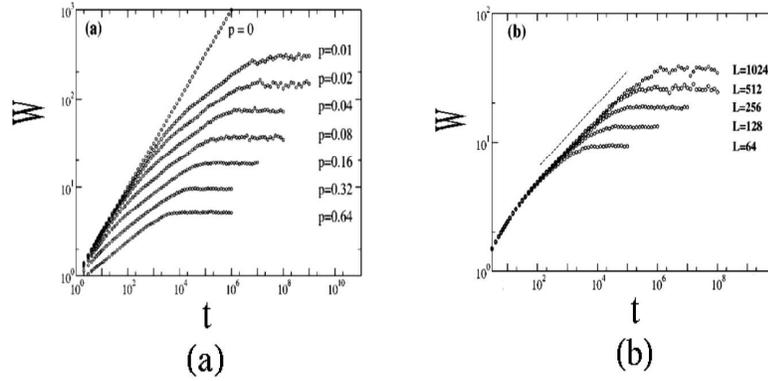


Figura 4.2: Gráficos W versus t para DB-DA. Em (a), $L = 256$ é fixado, e p varia como $p = 2^i/100$, com $i = 0, \dots, 6$; em (b), $p = 0.16$ é fixado, e L varia como $L = 2^j$, com $j = 5, \dots, 10$. Extraído de [60]. A reta mostrada em (b) tem coeficiente angular $\beta = 1/3$.

Baseado nas Eqs. 4.4 a 4.6 e na Eq. 2.7, Horowitz e Albano [60] propuseram a hipótese de escala

$$W \sim p^{-\delta} L^\alpha f\left(\frac{t}{p^{-y} L^z}\right), \quad (4.7)$$

onde $p > 0$, e f é a mesma função de escala que figura na Eq. 2.7. Pelos mesmos argumentos que levam à Eq. 2.8, devemos ter $p^{-\gamma} \sim L^{\alpha-\beta z} p^{\beta y - \delta}$ (Eq. 4.7). Porém $z = \alpha/\beta$ para qualquer p (Eq. 2.8), donde segue que os expoentes δ, y e γ não podem ser todos independentes, mas atendem à relação de escala

$$\beta y - \delta + \gamma = 0 \quad (4.8)$$

em qualquer dimensionalidade. Os expoentes δ, y e γ foram estimados a partir de dados de simulações, e a Eq. 4.8 verificada na Ref. [61] para os modelos competitivos DAR-DA e BD-DA, em $d = 2, d = 3$ a $d = 4$; nos dois modelos, γ depende de d . Os expoentes obtidos numericamente são mostrados na Tabela 4.1.

4.2 Teoria de Escala

Esta secção expõe dois argumentos que explicam os expoentes δ, y e γ para os modelos competitivos DAR-DA e BD-DA por scaling [62, 57]. Ambos deixam bastante claro que esses expoentes dependem das simetrias do modelo, e dos mecanismos que introduzem correlações entre colunas vizinhas, e não têm relação com a classe de universalidade da componente correlacionada (embora apenas Ref. [57] tenha enfatizado isto explicitamente).

<i>Modelo</i>	<i>d</i>	δ	<i>y</i>	γ
BD-DA	2	0.45 ± 0.01	0.97 ± 0.02	0.17 ± 0.01
	3	0.45 ± 0.04	0.99 ± 0.02	0.32 ± 0.02
	4	0.45 ± 0.04	0.99 ± 0.02	0.40 ± 0.03
DAR-DA	2	0.97 ± 0.04	1.97 ± 0.05	0.51 ± 0.05
	3	0.96 ± 0.04	1.9 ± 0.1	0.95 ± 0.05
	4	0.95 ± 0.04	1.9 ± 0.2	1.0 ± 0.1

Tabela 4.1: Expoentes de escala δ, y e γ , obtidos a partir de simulações dos modelos DB-DA e DAR-DA. As linhas da tabela verificam a Eq. 4.8 bastante satisfatoriamente. Dados extraídos de [61].

Ref. [62] trata os dois modelos de forma independente, e usa diretamente a invariância de escala em $t > t_0$ (em que todos os comprimentos e tempos têm uma única escala relevante) para concluir como W e t_x escalam com p , determinando assim δ e y . Seu argumento é apresentado a seguir.

Considere que dois modelos A (correlacionado) e B (DA) competem com probabilidades p e $q = 1 - p$, respectivamente. Partículas dos tipos A e B são depositadas aleatoriamente sobre o substrato, com um fluxo efetivo F . A taxa de deposição por sítio é

$$\tau_0^{-1} = \frac{F}{L^{d-1}},$$

e τ_0 é o intervalo médio entre a deposição de duas partículas *de qualquer tipo* num único sítio da rede, digamos i .

O fluxo de partículas do tipo A é $F_A = pF$, e a taxa de deposição de partículas do tipo A por sítio é

$$\tau_A^{-1} = \frac{F_A}{L^{d-1}} = \frac{p}{\tau_0},$$

onde τ_A é o intervalo entre a deposição de duas partículas *do tipo A* no sítio i . Analogamente,

$$\tau_B^{-1} = \frac{1-p}{\tau_0},$$

onde τ_B é o intervalo entre a deposição de duas partículas *do tipo B* em um único sítio.

Durante o intervalo τ_A , $N = \tau_A/\tau_B$ partículas são depositadas, em média, segundo as regras da deposição aleatória no sítio i , e, se $p \ll 1$,

$$N \approx \frac{\tau_A}{\tau_0}.$$

Neste intervalo, os incrementos de altura no sítio i se dão como um *passeio aleatório*, em que uma partícula é depositada no sítio i , e h_i incrementada de

uma unidade ($h_i \leftarrow h_i + 1$), com probabilidade $P = 1/L^{d-1}$, ou não sofre incremento algum, com probabilidade $1 - P$. O “caminhante” se desloca em média N “passos” na vertical, e o incremento η_i de altura no sítio i é uma variável aleatória gaussiana indexada por i , com média

$$\langle \eta_i \rangle = \frac{\tau_A}{\tau_0} = \frac{1}{p},$$

e variância¹ (v. também Sec. 2.3)

$$\sigma = \sqrt{\frac{\tau_A}{\tau_0} \left(1 - \frac{1}{L^{d-1}}\right)} \approx \sqrt{\frac{1}{p}}.$$

Considere que os processos do tipo A são partículas depositadas segundo as regras da *deposição balística*. Então, durante um intervalo τ_A , a altura da coluna \mathbf{x} e dos sítios vizinhos são incrementadas de $\eta(\mathbf{x})$, crescendo aleatoriamente com variância σ . Transcorrido τ_A , a altura do sítio i é igualada à altura do sítio vizinho de maior altura, correlacionando os dois sítios. No modelo DB puro, em que todas as partículas são do tipo A, o tempo necessário para correlacionar sítios vizinhos é da ordem do tempo de deposição de uma monocamada completa de partículas, $\delta t \sim 1$ (v. definição da unidade de tempo na pag. 7); as diferenças de altura entre vizinhos nesse intervalo só deve crescer até $\delta h \sim 1$. No modelo competitivo, portanto, as escalas de tempo estão dilatadas de τ_A , e as escalas de comprimento vertical, de σ . Por outro lado, Se há scaling, só pode existir uma escala de comprimento e tempo relevante, e essas escalas são σ e τ_A . Daí, a rugosidade escala como $W \sim \sigma \sim p^{-1/2}$, e o tempo característico como $t_x \sim \tau_A \sim p^{-1}$. Dessas relações, obtemos os expoentes exatos $\delta = 1/2$ e $y = 1$ para a deposição balística.

Se o processo do tipo A for a *deposição aleatória com relaxação de superfície*, os mesmos argumentos se sustentam, a não ser pelo fato de que o modelo DAR não é capaz de eliminar completamente as diferenças de altura entre sítios vizinhos em um único evento A. Assumindo que o tempo característico para correlacionar sítios vizinhos é $n\tau_A$, $n\tau_A/\tau_0$ eventos DA ocorrem no sítio i distribuídos entre n eventos DAR; o incremento de altura médio é $n\tau_A/\tau_0$, com variância $(n\tau_A/\tau_0)^{1/2}$. Um degrau grande de alturas é reduzido tipicamente de n , e há duas escalas de tamanho características, sejam elas $(n\tau_A/\tau_0)^{1/2}$ e n . Então, se a interface é auto-afim, as duas escalas devem ser da mesma ordem de grandeza, ie.

$$(n\tau_A/\tau_0)^{1/2} \sim n,$$

¹Os autores argumentam que a fração p de eventos do tipo A que ocorrem no intervalo τ_A nos outros sítios simultaneamente não afetam o resultado.

de onde obtemos $\tau_A \sim n$. Com isso, a escala característica de tempo será $n\tau_A/\tau_0 \sim \tau_A^2 \sim p^{-2}$, e a escala de comprimentos, $\sigma \sim \tau_A \sim p^{-1}$. Dessas relações, obtemos os expoentes exatos $\delta = 1$ e $y = 2$ para DAR.

Ref. [57] trata os modelos competitivos de forma mais geral, mostrando como os coeficientes A, B e C escalam com o tempo t_0 necessário para desenvolver correlações entre primeiros vizinhos, e depois procurando a escala de t_0 com p argumentando sobre as particularidades de cada modelo. A abordagem em Ref. [57] também dispensa que se considerem separadamente as escalas de comprimento e tempo. Seu argumento se inicia assumindo que t_0 seja o instante em que a rugosidade do regime transiente (DA) começa a escalar (Eqs. 4.1 e 4.6), o que resulta

$$C \sim t_0^{1/2-\beta}.$$

No modelo correlacionado puro, o tempo necessário para que as colunas comecem a estabelecer correlações entre vizinhos, e a interface seja auto-afim no raio de primeira vizinhança, é igual ao tempo de deposição de uma monocamada de partículas, $\delta t \sim 1$. Então espera-se que todos os tempos característicos estejam dilatados por um fator t_0 . Uma vez que $B \approx$ constante no processo correlacionado puro, esperamos que

$$B \sim t_0 \tag{4.9}$$

no modelo competitivo. Substituindo B na Eq. 4.7, e considerando que $f(x) \approx Cx^\beta$ no regime de crescimento, obtemos imediatamente (pelo acoplamento da rugosidade dos regimes de crescimento e saturação quando $t \sim t_x$)

$$A \sim t_0^{1/2}. \tag{4.10}$$

Na *deposição balística*, um único evento do tipo A é suficiente para estabelecer correlações entre vizinhos, e $t_0 \sim \tau_A$. Substituindo $t_0 \sim p^{-1}$ nas Eqs. 4.9 e 4.10, recuperamos os expoentes exatos $\delta = 1/2$ e $y = 1$ para DB.

Na *deposição aleatória com relaxação de superfície*, n eventos DAR serão necessários para estabelecer correlações. Ref. [57] argumenta que a supressão da diferença de altura entre vizinhos exige que o número n de eventos DAR no sítio i seja da ordem do número médio de eventos nos sítios vizinhos, ie. $n \sim \tau_A/\tau_0$. O tempo característico t_0 escala como $t_0 \sim n\tau_A$, com $n\tau_A \sim p^{-2}$, que substituído nas Eqs. 4.9 e 4.10, recupera os expoentes exatos $\delta = 1$ e $y = 2$ para DAR.

Cabe salientar que ambos os argumentos prevêm a relação de escala

$$\delta = y/2, \tag{4.11}$$

primeiro proposta em Ref. [61] como uma conjectura.

4.3 Conexão com a Teoria Contínua (1)

Para formular uma descrição contínua dos modelos competitivos DAR–DA e DB–DA, Horowitz, Monetti e Albano [59, 61] propuseram a seguinte equação de crescimento fenomenológica:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = G[h] + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (4.12)$$

onde G é o funcional que contém os mecanismos microscópicos de crescimento da componente correlacionada (Eqs. 3.14 e 3.15), e h é uma função das variáveis independentes posição, tempo e do parâmetro p .

Nos modelos competitivos com deposição aleatória, a rugosidade escala para todos os valores de $p > 0$, e a interface é auto-afim; com isso, a equação 4.12 é invariante sob transformações de escala para diferentes valores de $p \neq 0$.

No modelo DAR–DA, a equação (Eq. 3.14)

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

deve ser invariante sob as transformações

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = b\mathbf{x},$$

$$p \rightarrow p' = cp,$$

$$t \rightarrow t' = b^z c^{-y} t$$

e

$$h \rightarrow h' = b^\alpha c^{-\delta} h$$

para cada p . Substituindo essas equações na Eq. 3.14, obtemos

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu(p) b^{z-2} c^{-y} \nabla^2 h + b^{z/2-(d-1)/2-\alpha} c^{\delta-y/2} \eta(\mathbf{x}, t).$$

Exigindo que esta equação seja idêntica à Eq. 3.14, recuperamos os expoentes da classe EW (Sec. 3.3.1),

$$\alpha = \frac{3-d}{2},$$

$$z = 2,$$

se os coeficientes ν, D escalarem como

$$\nu \sim \nu_0 p^y \quad (4.13)$$

e

$$D \sim D_0 p^{-\delta+y/2}, \quad (4.14)$$

onde ν_0, D_0 são os coeficientes da Eq. 3.14 para o modelo DAR puro ($p = 1$).

No modelo DB–DA, a solução por scaling *falha* quando aplicada à Eq. KPZ, porque λ e ν escalam com b quando $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = b\mathbf{x}$ [4, 38, 39, 40]. Seria preciso determinar, em $d > 2$, formas como esses coeficientes reescalam quando a coordenada \mathbf{x} é reescalada (na Sec. 3.5.1, isso é feito em $d = 2$ usando uma simetria da equação KPZ válida em qualquer dimensão e um invariante de escala formado pela razão D/ν em $d = 2$; em $d > 2$, tal invariante de escala não é conhecido). Ainda assim, é possível formular um argumento de escala apenas para o parâmetro p , de forma a tornar possível que se determine como λ, ν escalam com p [61]. Então, assumindo que a interface é auto-afim, e aplicando as transformações

$$\begin{aligned} p &\rightarrow p' = cp, \\ t &\rightarrow t' = c^{-y}t, \\ h &\rightarrow h' = c^{-\delta}h \end{aligned}$$

à Eq. 3.15, obtemos

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu c^{-y} \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} c^{-(\delta+y)} (\nabla h)^2 + c^{\delta-y/2} \eta(\mathbf{x}, t).$$

Supondo que a Eq. 3.15 permanece invariante sob essas transformações, obtemos os coeficientes

$$\lambda \sim \lambda_0 p^{\delta+y} \quad (4.15)$$

e ν, D dados pelas Eqs. 4.13 e 4.14, onde λ_0 é o coeficiente do termo não-linear KPZ no modelo DB puro ($p = 1$).

Substituindo os valores de δ, y previstos pela teoria de escala e confirmados por simulações em de $d = 2$ a $d = 4$ (Tab. 4.1), obtemos os coeficientes [59, 61, 62, 57]

$$\nu \sim p^2$$

e

$$D = D_0$$

para o modelo DAR–DA (Eq. 3.14), e [60, 62, 57]

$$\nu \sim p,$$

$$\lambda \sim p^{3/2}$$

e

$$D = D_0$$

para o modelo DB–DA (Eq. 3.15) em qualquer dimensão, onde D_0 é uma constante. Note mais uma vez que os expoentes δ, y não são universais, e os coeficientes dos modelos competitivos não estão associados à classe de universalidade da componente correlacionada, mas aos modelos.

As relações entre as amplitudes de escala A, B e os coeficientes das equações de crescimento são conhecidas para os modelos na classe KPZ em $d = 2$ [63],

$$A \sim (D/\nu)^{1/2}, \quad (4.16)$$

$$B \sim (|\lambda|A)^{-1}. \quad (4.17)$$

Para a classe EW, elas são conhecidas em qualquer dimensão [36]:

$$A \sim (D/\nu)^{1/2}, \quad (4.18)$$

$$B \sim \nu^{-1}. \quad (4.19)$$

Os coeficientes ν, D e λ (Eqs. 4.13, 4.14 e 4.15) e as amplitudes A, B obtidas para os modelos DAR–DA e DB–DA a partir das Eqs. 4.16 a 4.19 são consistentes com os expoentes δ, y obtidos pela teoria de escala, e sugerem que os argumentos de escala para a Eq. KPZ e EW estão corretos.

Com a hipótese de invariância de escala da interface, Refs. [59, 61] foram capazes de relacionar os expoentes δ, y estimados numericamente, e amparados por uma teoria de escala [62, 57], com os coeficientes λ, ν de equações de crescimento contínuas para os modelos DAR–DA e DB–DA. Embora a invariância de escala por si só não seja capaz de explicar a origem da dependência não-linear dos coeficientes λ, ν em p [61], podemos relacioná-los com o tempo necessário para gerar correlações entre primeiros vizinhos, quando associamos a invariância de escala às teorias de escala da Sec. 4.2.

4.4 Conexão com a Teoria Contínua (2)

Com o mesmo objetivo de obter equações contínuas de crescimento para modelos competitivos, Muraca, Braunstein e Buceta [47] adotaram uma combinação, com parâmetro p , dos processos microscópicos que competem, e derivou equações a partir dos momentos de transição, no mesmo espírito da Sec. 3.7. O método foi aplicado originalmente à competição entre DB e DAR e ao modelo DAR–DA, mas é facilmente estendido ao modelo competitivo DB–DA.

Usando a notação introduzida nas Secs. 3.7 e 4.2, vamos denotar por $h_i(t)$ a altura $h(\mathbf{x}_i, t)$ no sítio \mathbf{x}_i e no instante t ; o conjunto de alturas $\{h_i(t)\}$ define a interface no instante t . Considere então os processos do tipo A (correlacionados)

com probabilidade p e B (DA), com probabilidade $1 - p$. Partículas do tipo A e B são depositadas com taxas

$$\tau_A^{-1} = \frac{p}{\tau_0}, \quad \tau_B^{-1} = \frac{1-p}{\tau_0} \quad (4.20)$$

por sítio (v. Sec. 4.2), respectivamente, e τ_0 é o intervalo entre a deposição de duas partículas de qualquer tipo em um sítio. No intervalo τ_0 , a altura h_i é incrementada, na média, de

$$\langle h_i(t + \tau_0) - h_i(t) \rangle = a_{\perp} p \sum_{j,k} w_j^{(k,A)} \Delta h_{ij}^{(k)} + a_{\perp} (1-p) \sum_{j,k} w_j^{(k,B)} \Delta h_{ij}^{(k)},$$

onde $w_j^{(k,J)}$ é a probabilidade com que uma partícula do tipo J incidente no sítio i seja depositada no sítio j , por um processo enumerado por k , definida como na Sec. 3.7; $\Delta h_{ij}^{(k)}$ é o incremento de altura no sítio i correspondente, em unidades do parâmetro de rede a_{\perp} .

Muraca, Braunstein e Buceta [47] propõem que a equação estocástica para este processo seja dada por

$$\frac{\partial h_i}{\partial t} = K_i^{(1,A)} + K_i^{(1,B)} + \eta_i(t). \quad (4.21)$$

$K_i^{(1,A)}$, $K_i^{(1,B)}$ são os primeiros momentos das taxas de transição dos processos A e B, dados por

$$K_i^{(1,A)} = \frac{a_{\perp}}{\tau_A} p \sum_{j,k} w_j^{(k,A)} \Delta h_{ij}^{(k)}$$

para os processos do tipo correlacionado e

$$K_i^{(1,B)} = \frac{a_{\perp}}{\tau_B} (1-p)$$

para a deposição aleatória, e $\eta_i(t)$ é um ruído com média zero e covariância

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = a_{\perp} \left(K_i^{(1,A)} + K_i^{(1,B)} \right) \delta_{ij} \delta(t - t').$$

Substituindo as Eqs. 3.26, 3.28 e 3.29 na Eq. 4.21, e levando adiante a suavização e a expansão da função degrau como descrito na Sec. 3.7 (Eq. 3.31), obtém-se a Eq. EW (Eq. 3.32) para o modelo DAR-DA em $d = 2$ [47],

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F(p) + \nu(p) \nabla^2 h + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (4.22)$$

com coeficientes

$$F(p) = \frac{a_{\perp}}{\tau_0} [(1-p)^2 + p^2],$$

$$\nu(p) = 2 \frac{c_1 a_{\parallel}^2}{\tau_0} p^2 \quad (4.23)$$

e

$$D(p) = a_{\perp} F(p). \quad (4.24)$$

De maneira análoga, substituindo as Eqs. 3.35, 3.36 e 3.37 na Eq. 4.21, e procedendo da mesma maneira, recuperamos a Eq. KPZ (Eq. 3.38) para o modelo DB-DA em $d = 2$,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F + \nu(p) \nabla^2 h + \frac{\lambda(p)}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (4.25)$$

com os coeficientes

$$F(p) = \frac{a_{\perp}}{\tau_0} [(1-p)^2 + p^2 c_0],$$

$$\nu = \frac{a_{\parallel}^2}{2\tau_0} p^2 (1 - c_0 - 2c_0 c_1), \quad (4.26)$$

$$\lambda = 2 \frac{a_{\parallel}^2}{a_{\perp} \tau_0} p^2 c_1 (5 - 4c_0 - c_1), \quad (4.27)$$

e D dado por Eq. 4.24.

Por essa derivação das equações de crescimento, os coeficientes λ, ν *não dependem* dos modelos considerados, mas são uma consequência das taxas de deposição dadas na Eq. 4.20, e devem ser válidas para os modelos competitivos *em geral*.

O método reproduzido aqui relaciona os coeficientes ν, λ de equações contínuas de crescimento com o parâmetro p por meio de uma teoria microscópica. Os coeficientes obtidos para o modelo DAR-DA são consistentes com $\delta = 1$, $y = 2$ e com as relações entre ν, D e as amplitudes A, B dadas nas Eqs. 4.18 e 4.19 se $p \rightarrow 0$. No entanto, os coeficientes ν, λ obtidos para DB-DA (Eqs. 4.26 e 4.27) *falham* em reproduzir os expoentes δ, y obtidos via teoria de escala para o modelo em $d = 2$ (Eqs. 4.16 e 4.17). Com isso, a conclusão final de que os coeficientes da equação de crescimento independem absolutamente do modelo *não pode estar correta*, se confrontada com os expoentes δ, y obtidos por scaling e as relações com as amplitudes de escala nas Eqs. 4.16 a 4.19. A tabela 4.2 resume os coeficientes obtidos pelos métodos expostos nas Sec. 4.3 e 4.4, e os expoentes δ, y obtidos a partir desses coeficientes e das relações nas Eqs. 4.16 a 4.19.

4.5 Deposição Balística Bi-dispersa (DBB)

O contexto dos modelos competitivos é apropriado para uma discussão inicial do modelo de *deposição balística bidispersa* (DBB), introduzido para descrever

<i>Modelo</i>	<i>Coefficientes e amplitudes de escala</i>	Refs. [59, 61] e Refs. [62, 57]	Ref. [47]
DAR-DA	ν $A \sim (D/\nu)^{1/2}$ $B \sim \nu^{-1}$	p^2 p^{-1} [$\delta = 1$] p^{-2} [$y = 2$]	p^2 p^{-1} p^{-2}
DB-DA ($d = 2$)	ν λ $A \sim (D/\nu)^{1/2}$ $B \sim (\lambda A)^{-1}$	p $p^{3/2}$ $p^{-1/2}$ [$\delta = 1/2$] p^{-1} [$y = 1$]	p^2 p^2 p^{-1} [$\delta = 1$] p^{-1} [$y = 1$]

Tabela 4.2: Coeficientes das equações de crescimento para os modelos DAR-DA e DB-DA, obtidas por métodos de scaling (Refs. [59, 61, 62, 57] e Secs. 4.3 e 4.2) e pela passagem ao limite das equações que descrevem os processos microscópicos (Ref. [47] e Sec. 4.4). Pela Eq. 4.11, obtemos $D \sim 1$ a partir da Eq. 4.14 em qualquer dimensão para ambos os modelos. O limite de validade da teoria de escala exposta na Sec. 4.2 é $p \rightarrow 0$, e só podemos comparar os coeficientes obtidos pelos dois métodos nesse limite. Os expoentes entre colchetes são os valores obtidos para δ, y a partir das relações entre as amplitudes de escala (definidas nas Eqs. 4.4 e 4.5) e dos coeficientes ν, λ (Eqs. 4.13 e 4.15); estas relações estão resumidas na segunda coluna.

processos de formação de rochas porosas. Rochas porosas, produzidas dentre outras formas pela sedimentação de grãos de areia, podem ter *porosidades* na faixa 0.05–0.25, depois que a fase sólida é consolidada. A *permeabilidade* depende da porosidade, na medida em que um depósito com porosidade zero é impermeável, mas também é parametrizada pela distribuição de tamanho e conectividade dos poros, e pela área específica da superfície interna (amostras com a mesma porosidade podem ter permeabilidades bastante diferentes). Outros autores reportam ainda a geometria fractal das fases porosa, sólida e da superfície do depósito [68, 69]. Estes dados pautaram os primeiros estudos usando o modelo DBB [64, 65], concentrados na geometria do interior do depósito (*bulk*); porém, não foi estabelecida qualquer conexão entre propriedades do bulk e a morfologia da interface [66].

Na versão em $d = 3$ do modelo, *dímeros* de dimensões $2 \times 1 \times 1$ e $1 \times 2 \times 1$ incidem verticalmente sobre um substrato inicialmente plano com probabilidade F , e igual fração de dímeros com cada orientação do eixo maior, e partículas de tamanho $1 \times 1 \times 1$, com probabilidade $1 - F$. Se $F = 0$, apenas partículas são depositadas, e o modelo é idêntico à deposição aleatória; nesse caso, o depósito é compacto, e a rugosidade não escala. A deposição de um dímero, no entanto, iguala a altura de colunas vizinhas, e pode formar vacâncias (ou *buracos*) no

depósito. O mecanismo de correlação entre colunas vizinhas pela deposição de um dímero é análogo à agregação lateral que caracteriza a deposição balística (partículas do tipo A, na Fig. 2.1), e esperamos que o modelo DBB pertença, para qualquer $F > 0$, à classe de universalidade KPZ. A Fig. 4.3 ilustra o modelo DBB em $d = 2$.

Figura 4.3: DBB em $d = 2$. A figura ilustra as posições de agregação A', B' de um dímero (A) e uma partícula (B). A deposição de um dímero gera correlações entre vizinhos por um mecanismo análogo à deposição de uma partícula do tipo A na deposição balística (v. Fig 2.1). O modelo DBB é um modelo competitivo entre a deposição de dímeros, análoga à deposição balística, e a deposição aleatória, com parâmetro F .

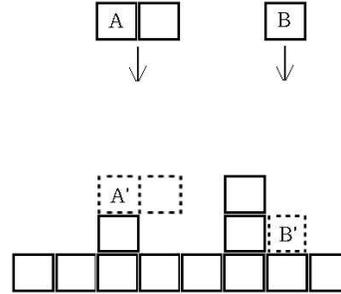
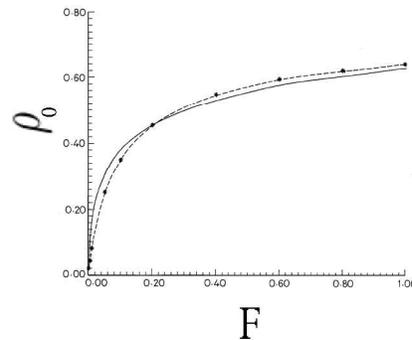


Figura 4.4: Variação da porosidade com F em $d = 3$. A linha sólida mostra o ajuste logarítmico; pontos e linha tracejada, dados das simulações em depósitos de tamanho 150^3 . Extraído de [64].



Neste modelo, um *buraco* é definido como um sítio desocupado, e um *poro* é definido como um agregado de buracos. Podemos definir a *densidade de buracos*, ou *porosidade* ρ como a razão entre o número de sítios desocupados do depósito e o número total de sítios (ocupados e desocupados). A rugosidade dos depósitos gerados por DBB é baixa durante a deposição das primeiras camadas; nesse regime inicial, portanto, a deposição de dímeros não é capaz de formar grandes poros, e podemos esperar que a densidade de buracos (e a sua conectividade) nas primeiras camadas seja *menor* que no topo do depósito, sendo uma grandeza dependente do número de partículas depositadas. Tarafdar e Roy, e Karmakar *et al* [64, 66] cresceram depósitos DBB até que a densidade média de buracos não mudasse pela adição de mais partículas, e tenha atingido seu valor limite,

a porosidade de saturação² ρ_0 . Tarafdar e Roy [64] verificaram que ρ_0 pode alcançar valores significativos para valores do parâmetro F tão baixos quanto 0.01 em $d = 3$. Ainda, estudaram a relação entre a porosidade de saturação e o parâmetro F , e obtiveram a relação

$$\rho_0 = A \log F + B \quad (4.28)$$

por ajuste da curva ρ_0 versus F , com A, B constantes (Fig. 4.4). A porosidade de saturação varia de $\rho_0 = 0$ ($F = 0$) a $\rho_0 \approx 0.63$ ($F = 1$) em $d = 3$ (ρ_0 se encontra no intervalo $[0, 0.50]$ em $d = 2$). A Fig. 4.5 mostra cortes transversais de depósitos em $d = 3$ para dois valores diferentes do parâmetro F .

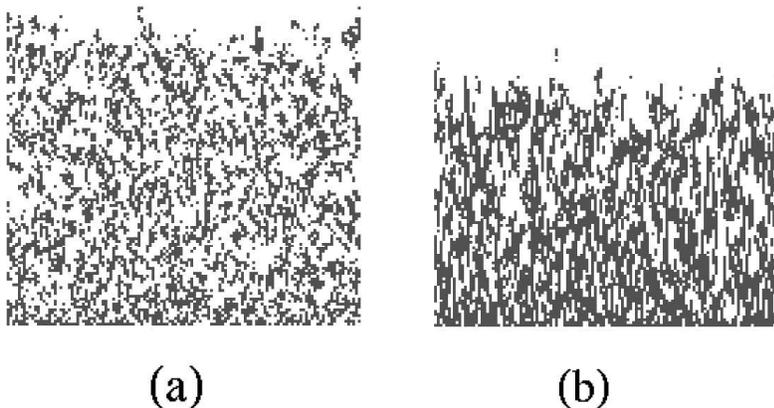


Figura 4.5: Seção reta vertical de depósitos DBB em $d = 3$, para (a) $F = 1$ e (b) $F = 0.20$ em um substrato de volume 128^3 . A baixas porosidades, os poros têm uma excentricidade grande na direção vertical, mas a conectividade lateral dos poros é muito mais baixa.

A fase porosa tem geometria fractal; a *dimensão de Hausdorff* da fase porosa foi estimada em $D_f \lesssim 1.90$ em $d = 2$ e $D_f \lesssim 2.87$ em $d = 3$ [64], usando a relação

$$M(\ell) \sim \ell^{D_f},$$

onde M é o número médio de buracos contados em caixas de tamanho ℓ^d em escalas de comprimento acima da menor escala em que comportamento fractal é observado (*cuttoff* inferior). Os valores de D_f mais baixos em cada dimensão são obtidos para baixos valores de ρ_0 .

O *limiar de percolação* vertical dos buracos, que dá uma medida da conectividade dos poros nessa direção, foi estimado em $\rho_c \approx 0.08$ ($F_c < 0.025$) em $d = 3$ [64].

²Aqui, *saturação* nada tem a ver com o regime estacionário da rugosidade, mas apenas denomina o valor limite da porosidade. O subíndice “0” é adotado para a porosidade de saturação para evitar qualquer confusão nesse sentido.

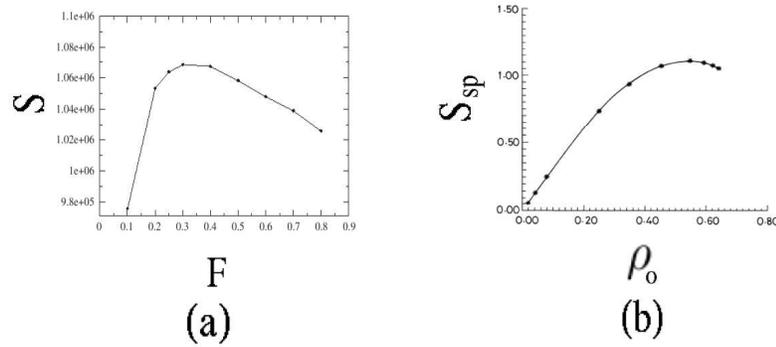
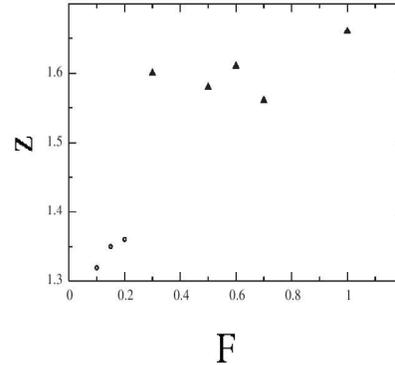


Figura 4.6: Área superficial e área superficial por sítio, ou área superficial específica para depósitos DBB em $d = 3$. A Figs. mostram gráficos de (a) área superficial *versus* F [66], e (b) área superficial específica *versus* ρ_0 [64]. A Fig. (b) foi obtida de depósitos de tamanho $L = 150$ em $d = 3$.

Figura 4.7: Expoente dinâmico z obtido como função do parâmetro F para o modelo DBB em $d = 3$. A figura mostra um degrau, que Ref. [66] associa à uma transição de conectividade dos poros do depósito.



A análise da estrutura formada por partículas e buracos em depósitos DBB torna necessário definir o termo *superfície interna*, que será daqui para frente usado sempre que nos referirmos à interface sólido-ar dos depósitos *incluindo* a estrutura de poros que se estende pelo interior do depósito. Nesse ponto, é importante ressaltar a diferença entre os significados de *superfície interna* e *superfície*, esta definida na Sec. 2.1 como o lugar geométrico dos *sítios de maior altura*. As duas definições não são conflitantes (embora os dois termos possam ser razão de alguma confusão), de vez que não há sentido em definir uma altura média ou rugosidade para a superfície interna, e qualquer referência aos fenômenos de enrugamento dinâmico nos remete imediatamente às definições de *superfície* e *interface* feitas no Cap. 2

Em $d = 3$, Tarafdar e Roy, e Karmakar *et al* [64, 66] calcularam a *área da superfície interna* S e a *área da superfície interna específica* S_{sp} do depósito

(Fig. 4.6). As curvas de área superficial apresentam um máximo; sua existência foi explicada pelo seguinte argumento: para pequenos valores de F , os poros são pequenos e estão isolados, e a maior parte dos poros próximos ao substrato não contribui para a área da superfície interna. Se F cresce, os poros aumentam em número e tamanho, e a superfície exposta aumenta. Mas apenas até o ponto ρ_L em que a largura dos poros na direção paralela ao substrato é comparável a L . A partir de ρ_L , o número de poros *decrece* com F , embora ρ_0 , que cresce como $\log(F)$ (Eq. 4.28), assuma valores muito próximos para todos os valores de $F \approx 1$. Nesse regime de pequeno número de (grandes) poros e porosidade alta, S e S_{sp} diminuem com ρ_0 (e F). Ref. [66] associa esse regime de alta conectividade dos buracos ao longo da direção paralela ao substrato à uma transição inequívoca dos expoentes de escala, em torno de $F = 0.30$ (Fig. 4.7), nessa dimensionalidade.

Os próximos capítulos tratarão do modelo de deposição balística bidispersa em maior detalhe, procurando dentre outras coisas associar a ele as teorias de escala para os modelos competitivos com deposição aleatória expostos nas Sec. 4.1 a 4.4, e abordar novamente a transição de conectividade observada em Ref. [66].

Capítulo 5

DBB – Propriedades de Interface

O modelo de deposição balística bidispersa (DBB) foi apresentado no capítulo anterior, onde foi realizada uma breve discussão dos principais resultados obtidos por outros autores. Karmakar, Dutta, Lebovka e Tarafdar [66] sugeriram a existência de uma transição de enrugamento dinâmico em $d = 3$, a partir de dados da evolução da área da superfície interna com o parâmetro F com que dímeros e partículas competem. A transição de enrugamento da superfície foi então associada a uma transição de conectividade dos poros do depósito.

Neste capítulo, tratamos da morfologia da interface gerada por DBB, sua evolução temporal e expoentes de escala em $d = 2$ e $d = 3$. Obtemos a equação contínua de crescimento que corresponde ao modelo discreto no limite hidrodinâmico em $d = 2$, relacionando os coeficientes desta equação com o parâmetro F e combinando resultados obtidos a partir de simulações. A análise numérica em $d = 2$ e $d = 3$ é comparada com as teorias de escala apresentadas na Sec. 4.2. Para completar este estudo, este capítulo também discute as distribuições de rugosidade, de onde podemos extrair algumas grandezas universais, e amparar a atribuição do modelo DBB à classe de universalidade KPZ de forma bastante bem fundamentada.

Além de determinar a classe de universalidade do modelo DBB usando todo o elenco de técnicas exposto até aqui, no recente contexto dos modelos competitivos com a deposição aleatória, o principal resultado obtido deste capítulo talvez seja a verificação da inexistência de transição dos expoentes de escala em qualquer dimensão. Disto ainda se ocupará o próximo capítulo.

5.1 Enrugamento Dinâmico DBB

O modelo DBB é um modelo competitivo em que a deposição aleatória de dímeros compete com a deposição aleatória, com probabilidades F e $1 - F$, respectivamente. A deposição de dímeros introduz correlações entre colunas vizinhas, e esperamos que seja válida a hipótese de escala na Eq. 4.7 e as relações de escala nas Eqs. 4.8 e 4.11 entre os expoentes δ, γ e y , com a substituição $p \rightarrow F$.

Foram realizadas simulações do modelo DBB em $d = 2$ ($L = 16$ a $L = 1024$) e $d = 3$ ($L = 16$ a $L = 512$) para probabilidades de $F = 0.02$ a $F = 0.40$. Os tempos de deposição atingidos variam de 10^4 a $9 \cdot 10^5$ mcs, e as médias configuracionais foram calculadas em até 10^4 depósitos independentes, nos menores tamanhos de substrato.

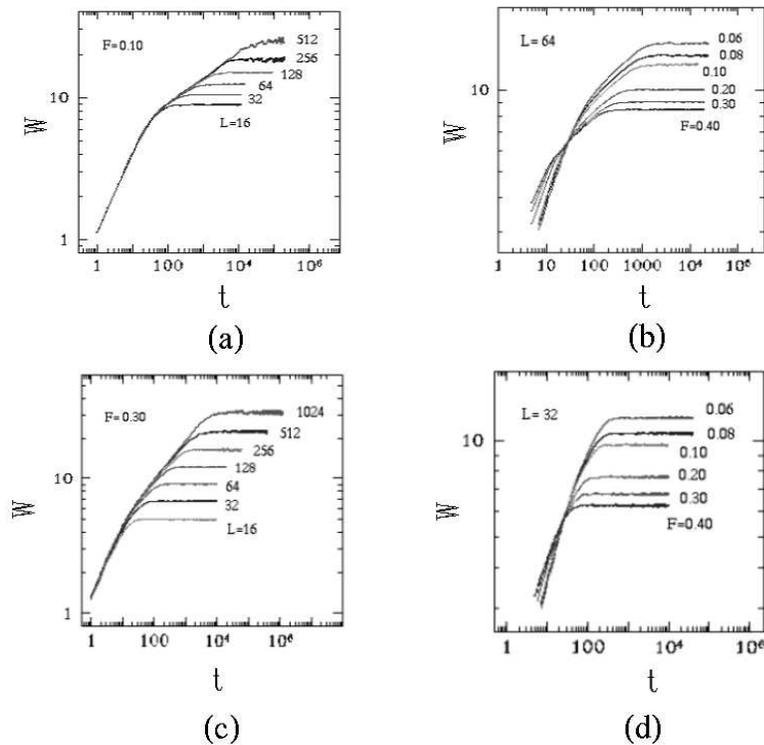


Figura 5.1: DBB em $d = 2$ e $d = 3$. As figuras (a) e (b) mostram as famílias de curvas $W(t)$ para $F = 0.10$ fixo e $L = 64$ fixo em $d = 3$; as figuras (c) e (d), curvas $W(t)$ para $F = 0.30$ fixo e $L = 32$ em $d = 2$. V. comentários no texto.

A Fig. 5.1 mostra gráficos W versus t para o modelo DBB. Nas Figs. 5.1(a) e 5.1(c), é possível ver como a região de scaling em regime de crescimento é pequena para os tamanhos de substrato até $L = 64$ em $d = 3$, e $L = 128$ em

$d = 2$, podendo até mesmo confundir-se com o transiente para os valores de $L = 16$ e 32 . A ausência de uma região de crescimento bem definida dificulta a estimativa do expoente de crescimento β a partir destes tamanhos de substrato [12], e por isso não será feita aqui.

Na Figs. 5.1(b) e 5.1(d), as curvas $W(L, t)$ a L fixo não se superpõem nos regimes dependentes do tempo. Isto pode ser explicado pela contaminação do transiente por uma fração de dímeros (que é significativa para $F > 0.10$), que tem o efeito de elevar a rugosidade para um pouco acima da rugosidade DA, nas primeiras camadas depositadas, e diminuir a duração do transiente, como resultado da evolução mais rápida da correlação entre colunas vizinhas.

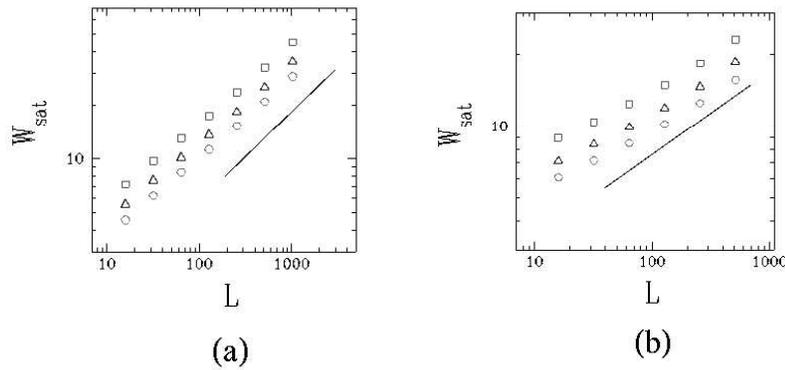


Figura 5.2: DBB em $d = 2$ e $d = 3$. A figura (a) mostra um gráfico log-log de W_{sat} versus L para $d = 2$ e probabilidades $F = 0.10$ (\square), 0.20 (\triangle) e 0.40 (\circ); a linha reta tem coeficiente angular $1/2$. A figura (b) mostra a mesma curva para $d = 3$; a linha reta mostrada nesta figura tem coeficiente angular 0.36 (v. comentários no texto).

Sabemos como a probabilidade F afeta as amplitudes de escala (Sec. 4.1). Então, fixando F , podemos calcular expoentes efetivos $z(F)$ e $\alpha(F)$ a partir das Eqs. 4.2 e 4.3. Esperamos que, pelas similaridades entre a deposição de dímeros e a deposição balística (v. Sec. 4.5, e Figs. 4.3 e 2.1), os modelos DB e DBB pertençam, para qualquer $F \neq 0$, à mesma classe de universalidade, e que, portanto, os expoentes de escala DBB sejam consistentes com os expoentes KPZ (Secs. 2.5.2 e 2.5.3).

5.1.1 Expoente de Rugosidade

A Fig. 5.2 mostra rugosidades de saturação $W_{\text{sat}}(L, F)$ versus L para DBB em $d = 2$ e 3 e alguns valores de F . Definimos inclinações sucessivas (Sec. 2.5.2)

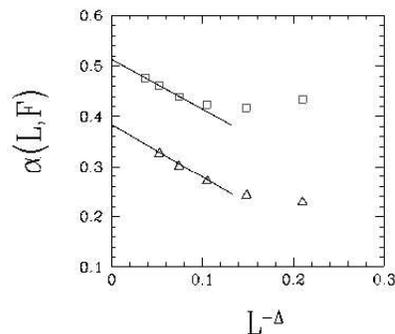
$$\alpha(L, F) = \frac{\log [W_{\text{sat}}(L', F)/W_{\text{sat}}(L'/r, F)]}{\log(r)}, \quad (5.1)$$

onde $L = L'r^{-1/2}$ e $r = 2$ ou 4 , tipicamente¹. Assumimos que $\alpha(L, F)$ escala como (v. Eq. 2.18)

$$\alpha(L, F) \approx \alpha(F) + CL^{-\Delta}, \quad (5.2)$$

onde $\alpha(F)$ é o expoente de rugosidade DBB e C uma constante, ambos para um dado valor de F . A Fig. 5.3 mostra o comportamento das inclinações $\alpha(L, F)$ para F fixo, e indica como os $\alpha(L, F)$ são extrapolados para se obter $\alpha(F)$. Os expoentes de correção ao expoente de escala α (Eq. 5.2) são da ordem da unidade, na prática; por isso, o ajuste direto, como na Fig. 5.2, resulta em expoentes de rugosidade *mais baixos* que o expoente de escala esperado (v. também Sec. 2.5).

Figura 5.3: DBB em $d = 2$ e $d = 3$. A figura mostra os expoentes efetivos $\alpha(L, F)$ versus $L^{-\Delta}$ para o modelo DBB em $d = 2$ e $F = 0.10$ fixo (\square) e para $d = 3$ e $F = 0.08$ fixo (\triangle). O ajuste de mínimos quadrados, representado pelas linhas cheias, resulta $\alpha(F = 0.10) \approx 0.51$ em $d = 2$ e $\alpha(F = 0.08) \approx 0.38$ em $d = 3$. A correção mais adequada à escala do expoente α é $\Delta = 0.5$ em $d = 2$ e 3 (v. Eq. 5.2).



Em $d = 2$, a correção Δ ao expoente de rugosidade é escolhida de forma a maximizar a correlação linear dos pontos $(\alpha(L, F), L^{-\Delta})$ na região de scaling (Eq. 5.2). Em $d = 3$, devido à limitação do tamanho do maior depósito ($L = 512$), a região de scaling não é grande o suficiente para determinar Δ desta maneira; então, simplesmente adotamos $\Delta = 0.5$, seguindo resultados obtidos para a deposição balística na estimativa² de α [27] nessa dimensionalidade.

A Fig. 5.4 mostra os expoentes $\alpha(F)$ obtidos para todos os valores da probabilidade F . Os $\alpha(F)$ estão concentrados em um domínio bem estreito, mesmo para os valores mais baixos da probabilidade F , onde a transição para o regime de saturação da rugosidade é lenta. Isto sugere um valor de *universal* de α para todo F .

O expoente de rugosidade DBB é estimado, pelos gráficos na Fig. 5.4, em $\alpha = 0.50 \pm 0.02$ em $d = 2$, e $\alpha = 0.39 \pm 0.03$ em $d = 3$, em excelente acordo

¹Os resultados não são alterados se definirmos $\alpha(L, F) = (1/2)D[\log W_{\text{sat}}^2(\log L, F)]$, onde D é o operador de diferenças finitas definido na Sec. 2.5.1. A preferência pela *rugosidade quadrática* no lugar da rugosidade (ou da *flutuação rms* de alturas, cf. Eq. 2.2) é justificada por motivos de precisão numérica, em alguns casos.

²Na Ref. [27], A extrapolação dos $\alpha(L)$ (Eq. 2.18) com $\Delta_0 = 0.55$ fixo resultava em expoentes consistentes com os obtidos variando Δ de forma a maximizar a correlação linear dos expoentes efetivos na região de scaling.

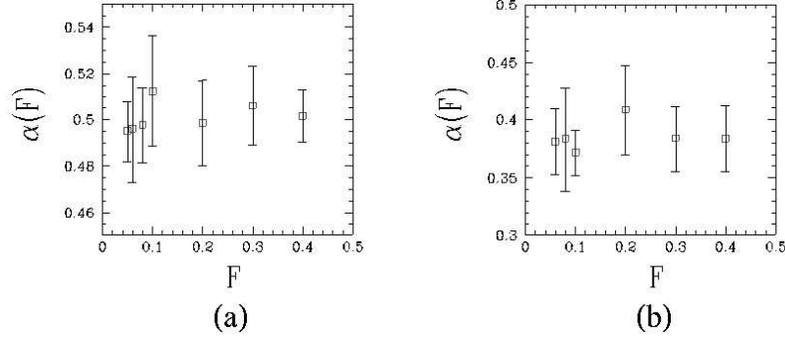


Figura 5.4: Expoentes de rugosidade DBB em (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$. Os $\alpha(F)$ não diferem mais que as barras de erro dos valores KPZ em $d = 2$ ($\alpha = 1/2$, exato) e $d = 3$ ($\alpha \approx 0.38$) para nenhum valor da probabilidade F .

com os expoentes de rugosidade KPZ nessas dimensionalidades [38, 39, 27]. As barras de erro nos dois expoentes levam em conta as flutuações nas medidas de rugosidade em regime estacionário em torno do valor médio (que são as *incertezas estatísticas* nos $\alpha(F)$ nas Figs. 5.4 (a) e (b)), e o desvio médio dos expoentes efetivos $\alpha(F)$ do valor esperado α (desvio médio da média) [67].

5.1.2 Expoente Dinâmico

A rugosidade no modelo DBB converge exponencialmente para o regime de saturação, como esperado, e o expoente dinâmico pode ser estimado a partir do tempo característico τ_k definido na Sec. 2.5.3, e do ajuste de inclinações sucessivas das curvas $\log \tau_k(\log L)$ a k, F fixos mostradas na Fig. 5.5. Definimos inclinações sucessivas (v. Sec. 5.1.1)

$$z(L, F) = \frac{\log [\tau_k(L')/\tau_k(L'/r)]}{\log(r)}, \quad (5.3)$$

onde $L = L'r^{-1/2}$ e $r = 2$ ou 4 , tipicamente. Assumimos que $z(L, F)$ tem a forma

$$z(L, F) \approx z(F) + CL^{-\sigma}, \quad (5.4)$$

e esperamos que

$$z(F) \approx z, \quad (5.5)$$

onde z é o expoente dinâmico DBB e C constante, desde que $k \approx 1$ (v. Sec. 2.5.3). A Fig. 5.6 mostra como os expoentes $z(L, F)$ são extrapolados para obter os expoentes $z(F)$. Para cada valor de F , k é escolhido de forma a diminuir as flutuações dos $z(L, F)$ na região de scaling (Eq. 5.4) e minimizar o erro de extrapolação.

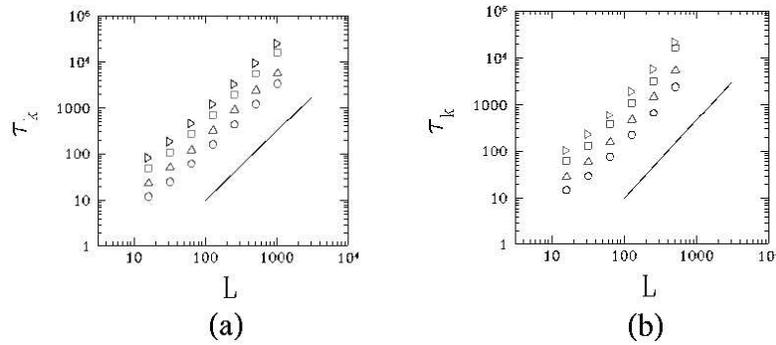
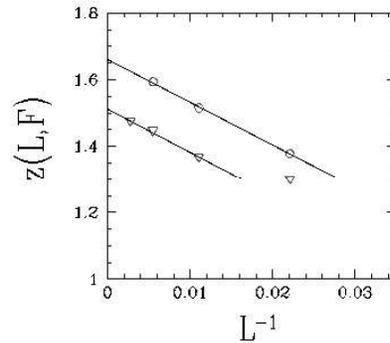


Figura 5.5: DBB em $d = 2$ e $d = 3$. A figura (a) mostra um gráfico log-log de τ_k versus L para $d = 2$ e probabilidades $F = 0.06$ (\triangleright), 0.10 (\square), 0.20 (\triangle) e 0.40 (\circ); a linha reta tem coeficiente angular $3/2$. A figura (b) mostra a mesma curva para $d = 3$; a linha reta mostrada nesta figura tem coeficiente angular 1.66 (v. comentários no texto). Para calcular τ_k , usamos $k = 0.8$ na Eq. 2.22.

Figura 5.6: DBB em $d = 2$ e $d = 3$. A figura mostra expoentes efetivos $z(L, F)$ versus $L^{-\sigma}$, com $\sigma = 1$, extrapolados para $L \rightarrow \infty$ para o modelo DBB em $d = 2$ e $F = 0.06$ (∇) fixo e $d = 3$ e $F = 0.10$ fixo (\circ); as linhas cheias são retas de mínimos quadrados para os dois conjuntos de pontos. O parâmetro k é escolhido de forma a minimizar as flutuações de $z(L, F)$ na região de scaling. Os pontos em $d = 2$ mostrados na figura foram obtidos a partir de tempos característicos τ_k usando $k = 0.9$; os pontos em $d = 3$, usando $k = 0.8$.



A Fig. 5.7 mostra os expoentes $z(F)$ em $d = 2$ e 3 para todos os valores de F , obtidos usando k na faixa 0.8 – 0.95 . Novamente, nenhuma alteração significativa nos expoentes pode ser percebida, mesmo para probabilidades tão pequenas quanto $F = 0.06$, que está bem abaixo da probabilidade de transição $F \approx 0.30$ sugerida na Ref. [66] (v. Fig. 4.7). O expoente dinâmico DBB é estimado, pelos gráficos na Fig. 5.7, em $z = 1.50 \pm 0.04$ em $d = 2$, e $z = 1.60 \pm 0.10$ em $d = 3$, em acordo com o expoente dinâmico KPZ estabelecido nessas dimensionalidades [38, 39, 27].

5.2 Amplitudes de Escala

Argumentamos que a deposição balística bidispersa é a competição entre um modelo correlacionado puro na classe da deposição balística (com probabilidade

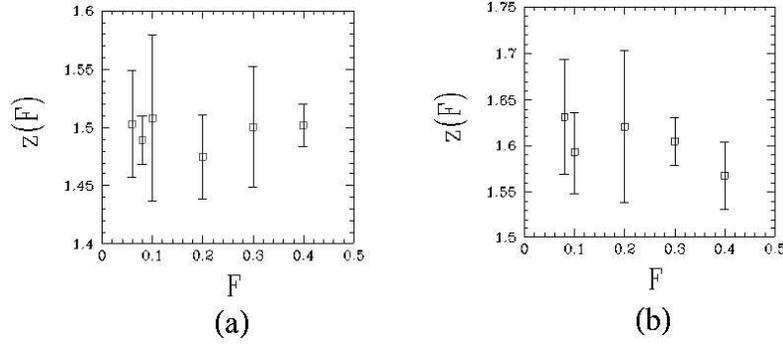


Figura 5.7: Expoentes dinâmicos DBB em (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$. Os $z(F)$ não diferem mais que as barras de erro dos valores KPZ em $d = 2$ ($z = 3/2$, exato) e $d = 3$ ($z \approx 1.6$) para qualquer valor da probabilidade F .

F) e a deposição aleatória (com probabilidade $1 - F$). De acordo com o exposto no Cap. 4, a competição com a deposição aleatória pertence à classe de universalidade da componente correlacionada, e o modelo DBB deve atender a hipótese de escala

$$W \sim AL^\alpha f\left(\frac{t}{t_\times}\right)$$

para qualquer $F > 0$, onde $f(x) \sim 1$ se $x \gg 1$, $f(x) \sim x^\beta$ se $x \ll 1$ e $\alpha, z = \alpha/\beta$ são os expoentes de escala da classe KPZ.

No regime independente do tempo, $t \gg t_\times$, a rugosidade satura no valor

$$W = W_{\text{sat}}(L, F) \sim AL^\alpha,$$

com

$$A \sim F^{-\delta}. \quad (5.6)$$

O tempo característico t_\times escala como

$$t_\times \sim BL^z,$$

onde

$$B \sim F^{-y}. \quad (5.7)$$

As amplitudes de escala A, B refletem o retardo na comunicação das correlações na direção paralela ao substrato, introduzido pela componente DA. Os expoentes δ, y dependem unicamente da velocidade com que a componente correlacionada destrói as flutuações aleatórias de altura entre colunas vizinhas (v. Sec. 4.2 e Ref. [57]). No modelo DBB, a deposição de um único dímero (partícula do tipo A na Fig. 4.3) elimina completamente a diferença de altura entre vizinhos, exatamente como a agregação lateral de uma partícula na deposição balística (partícula do tipo A na Fig. 2.1). Os argumentos de escala da

Sec. 4.2 aplicados ao modelo DBB resultam, então, nos mesmos expoentes δ, y da deposição balística, $\delta = 1/2$ e $y = 2\delta = 1$, se $F \ll 1$.

Para calcular o expoente δ , definimos amplitudes dependentes do tamanho

$$A(L, F) = W_{\text{sat}}/L^\alpha, \quad (5.8)$$

e assumimos que, na região de escala,

$$A(L, F) \approx A(F) + CL^{-\Omega}, \quad (5.9)$$

onde $A(F)$ é a amplitude de escala da rugosidade de saturação (Eq. 5.6) e $L^{-\Omega}$ é uma correção de tamanho finito. As amplitudes de escala $A(F)$ são obtidas a partir da rugosidade de saturação extrapolando $A(L, F) = W_{\text{sat}}(L, F)/L^\alpha$ para $L \rightarrow \infty$, e Ω é escolhido de forma a maximizar a correlação linear dos pontos $(A(L, F), L^{-\Omega})$ na região de escala (Fig. 5.8).

A Fig. 5.9 mostra expoentes efetivos definidos como

$$\delta(F) = -\frac{\log [A(F'')/A(F')]}{\log(F''/F')},$$

onde $F = \sqrt{F''F'}$. O expoente $\delta(F)$ escala como

$$\delta(F) \approx \delta + CF^\epsilon, \quad (5.10)$$

onde ϵ é um expoente de correção ao expoente de escala δ . O expoente ϵ é ajustado de forma a se obter o melhor ajuste dos pontos $(\delta(F), F^\epsilon)$ na região de escala a uma reta. Extrapolando $\delta(F)$ para $F \rightarrow 0$, obtemos $\delta = 0.51 \pm 0.03$ ($d = 2$) e $\delta = 0.53 \pm 0.05$ ($d = 3$), levando em conta as barras de erro na extrapolação dos expoentes efetivos $\delta(F)$. Estes resultados estão em acordo com a teoria de escala para o modelo, $\delta = 1/2$ em qualquer dimensão. Os expoentes ϵ que permitiram os melhores ajustes foram $\epsilon = 0.9$ em $d = 2$ e $\epsilon = 0.44$ em $d = 3$.

De maneira absolutamente análoga, para calcular o expoente y definimos amplitudes

$$B(L, F) = \tau_k/L^z. \quad (5.11)$$

Na região de escala, esperamos que

$$B(L, F) \approx B(F) + CL^{-\Sigma}, \quad (5.12)$$

onde $B(F)$ é a amplitude de escala do tempo característico e C é uma constante. Observamos, contudo, que $B(L, F)$ não apresenta correções fortes à escala (Eqs. 2.23 e 5.7), e os melhores resultados foram obtidos ajustando a curva $\log[B(L, F)]$ versus $\log(F)$ a uma reta, para L suficientemente grande. A Fig.

Figura 5.8: Amplitude de escala da rugosidade DBB. A figura mostra $A(L, F)$ versus $L^{-\Omega}$ para os valores $F = 0.20$ (\circ) e $F = 0.40$ (∇) em $d = 2$, e $F = 0.20$ (\square) e $F = 0.40$ (\triangle) em $d = 3$, e retas de mínimos quadrados que ajustam os maiores valores de L . Os melhores ajustes foram obtidos usando $\Omega = 0.5$ em $d = 2$ e $\Omega = 0.8$ em $d = 3$. Os expoentes de rugosidade usados na extrapolação ($\alpha = 0.5$ em $d = 2$ e $\alpha = 0.37$ em $d = 3$) foram obtidos na Sec. 5.1.1.

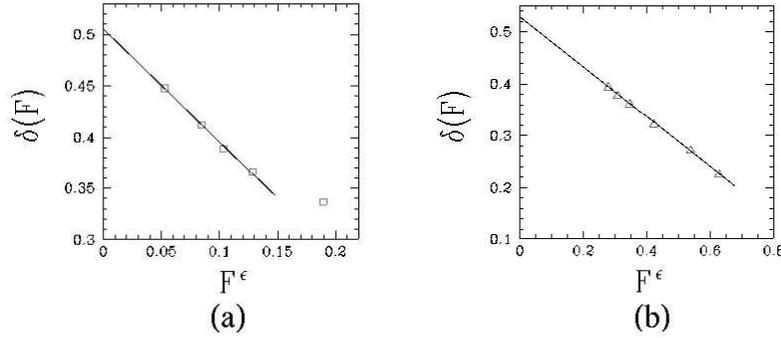
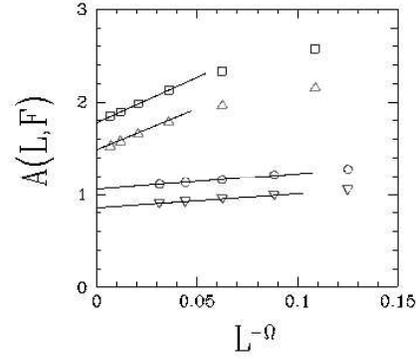


Figura 5.9: Expoente δ DBB. A figura mostra as extrapolações dos expoentes efetivos $\delta(F)$ em $d = 2$ (a) e $d = 3$ (b); as linhas cheias são ajustes de mínimos quadrados para os 3 e 4 primeiros pontos (menores valores de F) em (a) e (b), respectivamente. Pelo ajuste nas figuras, obtemos $\delta \approx 0.5$ em ambas as dimensionalidades (v. texto).

5.10 mostra estas curvas para alguns valores de L fixo; o expoente y obtido pelo ajuste linear dessas curvas é $y = 1.05 \pm 0.10$ em $d = 2$ e $y = 1.10 \pm 0.10$ em $d = 3$, em acordo com o valor previsto pela teoria de escala, $y = 1$. O expoente y não deve ser afetado pelo parâmetro k (v. Eq. 2.23), que é variado de forma a maximizar a correlação linear dos pontos ($\log[B(L, F)], \log(F)$).

5.3 Equação Fenomenológica de Crescimento

Os expoentes α, z obtidos numericamente sugerem que a deposição balística bidispersa pertença de fato à classe da deposição balística. Ainda, os expoentes δ, y obtidos por scaling, e confirmados numericamente, reforçam a similaridade entre os dois modelos, também do ponto de vista da evolução das correlações entre colunas vizinhas, em qualquer dimensão. Portanto, no limite contínuo, o modelo DBB pode ser descrito pela Eq. KPZ (Eqs. 3.15 e 3.38) com coeficientes

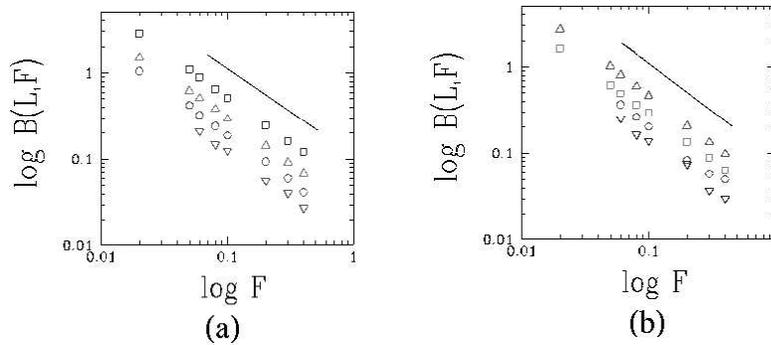


Figura 5.10: Exponente y DBB. As figuras mostram as curvas $\log[B(L, F)]$ versus $\log(F)$ a L fixo em (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$. A figura (a) mostra curvas para os tamanhos $L = 64$ (\square), 128 (\triangle), 256 (\circ) e 512 (∇); a figura (b), para os tamanhos $L = 64$ (\triangle), 128 (\square), 256 (\circ) e 512 (∇). As curvas se superpõem e, para maior clareza dos gráficos, foram deslocadas verticalmente umas das outras. As linhas retas têm coeficientes angulares (a) -1 e (b) -1.10 , e resultam do ajuste de mínimos quadrados destas curvas (v. texto). Os valores de k que resultam nos melhores ajustes são $k = 0.8$ em $d = 2$ e $0.7 \leq k \leq 0.9$ em $d = 3$.

(v. Sec. 4.3)

$$\nu \sim F \quad (5.13)$$

e

$$\lambda \sim F^{3/2} \quad (5.14)$$

em qualquer dimensão.

Em $d = 2$, o conhecimento das relações entre as amplitudes de escala e os coeficientes da Eq. KPZ (Eqs. 4.16 e 4.17) nos permite estudar o comportamento do termo cinético e seu expoente de escala numericamente, a partir da relação de escala entre a taxa de crescimento da altura média dos depósitos e λ . Krug e Meakin [70] mostraram que a correção de tamanho finito à velocidade de crescimento em regime de saturação ($t \gg t_x$) para a deposição balística em $d = 2$ é dada por

$$\Delta v(L) = -\frac{C\lambda}{L},$$

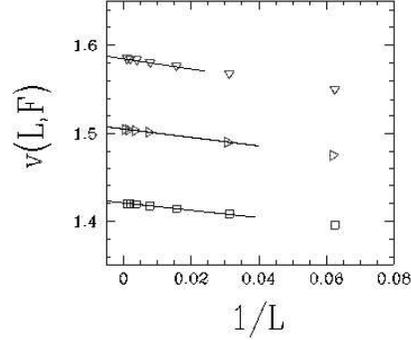
onde C é uma constante e $\Delta v = v(L) - v_\infty$ é a diferença entre as velocidades de crescimento da altura média em um substrato finito e de tamanho infinitamente grande³. Amar e Family [63] mostraram, por scaling, que $C \propto D/\nu$. Portanto, pelas Eqs. 5.13 e 5.14, podemos esperar que a velocidade de crescimento no modelo DBB seja

$$v(L, F) \sim -\frac{G}{L} + v_\infty, \quad (5.15)$$

³Na prática, um substrato infinito permanece em regime de crescimento por um tempo infinitamente longo; ou seja, o substrato não satura durante o tempo de deposição.

onde $G \sim D\lambda/\nu$. A Fig. 5.11 mostra gráficos de $v(L, F)$ versus $1/L$ para

Figura 5.11: Velocidade de crescimento da altura média DBB em $d = 2$. A Figura mostra curvas $v(L, F)$ versus $1/L$ a F fixo para as probabilidades $F = 0.10$ (∇), $F = 0.08$ (\triangleright) e $F = 0.06$ (\square). O coeficiente linear do ajuste por reta nas curvas é igual à razão $G = D\lambda/\nu$ (Eq. 5.15).



alguns valores de F . O coeficiente angular obtido do ajuste por reta destas curvas é igual a G . A Fig. 5.12 mostra inclinações sucessivas

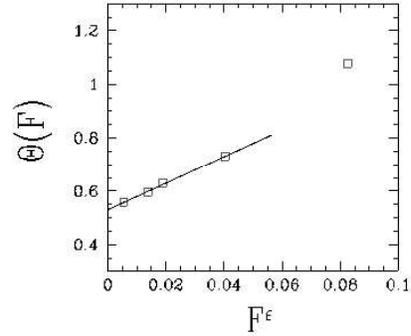
$$\Theta(F) = \frac{\log[G(F'')/G(F')]}{\log(F''F')}, \quad (5.16)$$

onde $F = \sqrt{F''F'}$; esperamos que

$$\Theta \approx \theta + JF^\epsilon, \quad (5.17)$$

onde θ é o expoente com que G escala com F ($G \sim F^\theta$), J é uma constante e ϵ é um expoente de correção à escala de G . Pelo ajuste desta figura, obtemos

Figura 5.12: Expoente θ DBB. A figura mostra inclinações sucessivas $\Theta(F)$ versus F^ϵ . O expoente ϵ é ajustado de forma a maximizar a correlação linear dos pontos na região de escala (Eqs. 5.16 e 5.17). O melhor ajuste dos pontos, indicado pela linha cheia na figura, resulta $\theta = 0.53 \pm 0.06$, com $\epsilon = 1.55$.



$\theta \approx 1/2$, e $G \sim D\lambda/\nu \sim F^{1/2}$. Este resultado é consistente com as Eqs. 5.13 e 5.14 para as escalas de ν e λ , sendo que D se mantém finito quando $F \rightarrow 0$. Isto confirma o resultado obtido na Sec. 4.3, ao menos em $d = 2$, e reforça a validade dos argumentos de escala para a Eq. KPZ.

5.4 Distribuições de Rugosidade

Foltin *et al* e Plischke *et al* [73, 74] sugerem, em estudo sobre interfaces geradas por passeio aleatório em $d = 2$, que as flutuações de rugosidade em diferen-

tes amostras podem servir à caracterização de superfícies geradas por modelos discretos de crescimento. Em $d = 2$, o perfil de alturas no estado estacionário KPZ é um passeio aleatório discretizado [75, 76], e Ref. [73] mostra que a probabilidade $P_L(w_2)$ de que a rugosidade quadrática de uma dada configuração estacionária esteja na faixa $[w_2, w_2 + dw_2]$ é dada por

$$P_L(w_2) = \frac{1}{\langle w_2 \rangle} \Phi \left(\frac{w_2}{\langle w_2 \rangle} \right), \quad (5.18)$$

onde w_2 é a *rugosidade quadrática de saturação* (Eq. 2.3), e Φ é uma função *universal*, que pertence à *classe de universalidade do passeio aleatório*. A rugosidade w_2 é medida em intervalos iguais no regime $t \gg t_\times$, em muitos depósitos diferentes, e $\langle w_2 \rangle$ denota uma média temporal e configuracional da rugosidade quadrática de saturação. Rácz e Plischke [77] mostraram que a Eq. 5.18 pode ser estendida aos modelos em $d = 3$, e, embora não seja em geral possível determinar sua forma fechada, Φ também é uma função universal nessa dimensionalidade.

Em uma abordagem alternativa, Aarão Reis [78] adotou a forma de escala

$$P_L(w_2) = \frac{1}{\sigma} \Psi \left(\frac{w_2 - \langle w_2 \rangle}{\sigma} \right), \quad (5.19)$$

onde $\sigma = \sqrt{\langle w_2^2 \rangle - \langle w_2 \rangle^2}$ é a *flutuação rms da rugosidade quadrática de saturação*, e Ψ é uma função universal. A Fig. 5.13 mostra a superposição, em $d = 2$ e $d = 3$, de distribuições de rugosidade de saturação DBB e uma distribuição gerada pelo modelo *sólido sobre sólido restrito* (da sigla em inglês, RSOS) [79]. O modelo RSOS pertence à classe KPZ em qualquer dimensão, e as distribuições geradas por RSOS são usadas para comparação. Por estas figuras, é possível ver o bom colapso de dados para um único tamanho em $d = 2$ e $d = 3$, mas o mesmo se repete em todos os tamanhos de substrato em que foram realizadas simulações do modelo DBB.

A função Ψ também pode ser caracterizada quantitativamente por coeficientes formados pela razão (adimensional) entre o n -ésimo momento da distribuição P_L ,

$$M_n = \sum_{w_2} (w_2 - \langle w_2 \rangle)^n P_L(w_2),$$

e σ^n . Se o colapso de duas ou mais distribuições falha, esperamos que estes coeficientes difiram entre si [78]. Consideramos os dois coeficientes não triviais de ordem mais baixa: o coeficiente de *assimetria* (ou *skewness*) S ,

$$S = \frac{M_3}{\sigma^3},$$

e a *curtose* Q ,

$$Q = \frac{M_4}{\sigma^4} - 3.$$

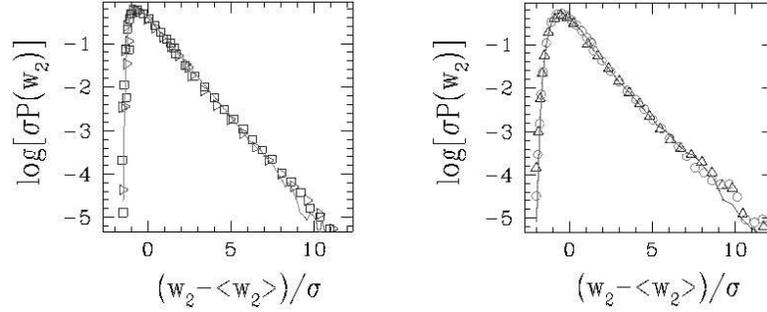


Figura 5.13: Distribuições de rugosidade DBB. As figuras mostram gráficos log-linear de σP_L versus $(w_2 - \langle w_2 \rangle)/\sigma$ em (a) $d = 2$, para o tamanho $L = 128$ e probabilidades $F = 0.06$ (\triangle) e $F = 0.10$ (\square), e em (b) $d = 3$ para o tamanho $L = 128$ e probabilidades $F = 0.06$ (\triangle) e $F = 0.20$ (\square). A linha cheia indica, nas duas figuras, a distribuição reescalada de rugosidades do modelo RSOS.

F	Q	S
0.10	5.87 ± 0.3	1.73 ± 0.025
0.20	5.42 ± 0.2	1.69 ± 0.022
0.30	5.50 ± 0.2	1.69 ± 0.014
0.40	5.37 ± 0.2	1.68 ± 0.012

Tabela 5.1: Assimetria e curtose BBD em $d = 3$. Os valores de S e Q estão de acordo com seus valores KPZ esperados [78], $S \approx 1.7$ e $Q \approx 5.4$.

A Tab. 5.1 mostra valores de assimetria e curtose para o modelo DBB, para alguns valores de F em $d = 3$. Os mesmos coeficientes, calculados para outros modelos na classe KPZ em $d = 3$, têm valores assintóticos $S = 1.70 \pm 0.02$ e $Q = 5.4 \pm 0.3$ [78]. O acordo com estes coeficientes indica que as distribuições de rugosidade para o modelo DBB têm a forma esperada para os modelos na classe KPZ, e remete o modelo DBB à classe KPZ para qualquer valor de $F \neq 0$.

Capítulo 6

DBB – Geometria dos Agregados em $d = 3$

No capítulo anterior, estudamos as principais propriedades de superfícies geradas por DBB, e, no que diz respeito à classe de universalidade do modelo, o tema foi esgotado. O principal objetivo deste capítulo é estabelecer a relação entre a geometria do agregado e os processos de superfície que determinam a dinâmica do sistema e a formação de buracos e poros. Em outro modelo competitivo em que há crossover de expoentes de escala [80, 81], Yu e Amar [9] caracterizaram detalhadamente a estrutura interna dos depósitos, e observaram duas geometrias diferentes da superfície interna, bem definidas e separadas em dois intervalos do parâmetro do modelo. Este trabalho sugere pela primeira vez uma forma de relacionar estes dois temas, e é usado como modelo para a secção que trata do assunto (Sec. 6.2).

Mostraremos, neste capítulo, que a superfície interna não passa por um máximo, que, como sugerido por outros autores [66], estaria relacionado com uma transição de conectividade dos poros em $F \approx 0.30$ (Fig. 4.6).

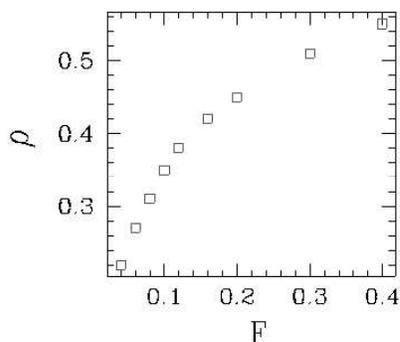
Nas seções seguintes, a relação entre a porosidade e o parâmetro F é estudada, e a conectividade dos poros em $d = 3$ é analisada em detalhe; o limiar de percolação do modelo DBB é estimado em $F_c \approx 0.04$. Em seguida, a dinâmica da superfície é relacionada com a sua geometria, e mostramos como ela deriva imediatamente das relações de escala estudadas na Sec. 4.2. A geometria do agregado exhibe expoentes característicos dos agregados gerados pelo modelo DB puro, o que sugere propriedades universais da estrutura.

6.1 Porosidade e Conectividade dos Poros

A fase sólida em depósitos gerados por DBB é completamente conectada para qualquer valor de F , e, sob este aspecto, o modelo em $d = 3$ se aproxima bastante das rochas porosas a que se propõe descrever originalmente [64]. Por isso, as propriedades dos agregados gerados por DBB, nesta dimensionalidade, são particularmente interessantes do ponto de vista prático.

A Fig. 6.1 mostra um gráfico de porosidade *versus* F para o modelo DBB em $d = 3$, para $L = 128$ fixo. Os pontos mostrados nesta figura se ajustam bastante bem à curva na Fig. 4.4 nesta faixa do parâmetro F ; não obstante, existe uma diferença marcante entre as variáveis *porosidade* e *porosidade de saturação*, adotada nas Refs. [64, 66]. Este tema será melhor explorado na próxima secção.

Figura 6.1: Porosidade para DBB em $d = 3$. A figura mostra a porosidade ρ *versus* F para o tamanho $L = 256$ e recobrimento fixo. Os pontos mostrados nesta figura se ajustam bem à curva na Fig. 4.4.



A quantidade mais simples que podemos calcular para caracterizar a conectividade dos poros em agregados é a *probabilidade de percolação* P . A Fig. 6.2 mostra a probabilidade de percolação da fase porosa como função de F e da porosidade, ambos calculados a recobrimento fixo. Por esta figura, observamos que a fase porosa em depósitos gerados por DBB tem limiares de percolação mais baixos que a densidade crítica no modelo de percolação de buracos (PB) na mesma dimensionalidade. O modelo PB trata da conectividade de buracos distribuídos aleatoriamente com probabilidade p ; a densidade p de buracos neste modelo equivale à porosidade no modelo DBB. Em $d = 3$, $p_c \approx 0.3$ para o modelo PB [71], e $\rho_c \approx 0.20$ ($F_c \approx 0.04$) para o modelo DBB, assintoticamente. Este valor se encontra *acima* do limiar de percolação de buracos obtido em Ref. [64], $\rho_c = 0.08$ (v. Sec. 4.5).

O algoritmo usado para identificar os buracos que formam o agregado percolante foi o Hoshen-Kopelman [82, 83]. Os dados numéricos usados neste capítulo foram obtidos a partir de depósitos DBB em $d = 3$ e tamanhos relativamente reduzidos ($L \leq 256$), devido a restrições de memória; os tempos de deposição

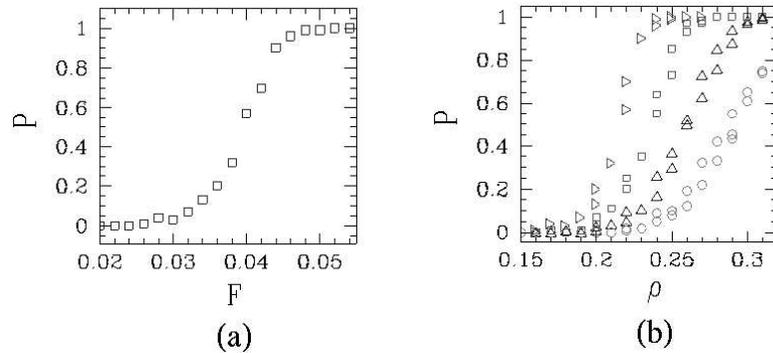


Figura 6.2: Percolação da fase porosa para DBB em $d = 3$. A figura mostra (a) a probabilidade de percolação da fase porosa P versus F , para $L = 256$ fixo, e (b) P versus a porosidade ρ para depósitos DBB nos tamanhos $L = 256$ (\triangleright), $L = 128$ (\square), $L = 64$ (\triangle) e $L = 32$ (\circ). Em (b), é possível ver que $\rho_c \approx 0.20$ ($F_c \approx 0.04$, na Fig. (a)) se $L > 256$. As curvas em (a) e (b) são curvas de recobrimento fixo.

atingidos variam de 1 a 150 mcs para todos os valores da probabilidade F .

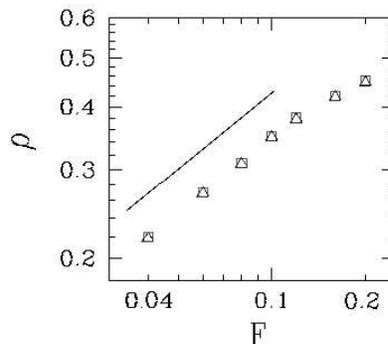
Um corolário das teorias de escala apresentadas na Sec. 4.2 pode ser capaz de esclarecer a relação entre a porosidade e a probabilidade F em termos da dinâmica da formação de buracos e poros na superfície [72]. Argumentamos que, como discutido na Sec. 4.2, se $F \ll 1$, dímeros são depositados em intervalos da ordem de $\tau_A \sim F^{-1}$. Tipicamente, pela deposição de partículas segundo as regras da deposição aleatória que ocorrem entre a deposição de dois dímeros, a diferença de altura entre sítios vizinhos cresce até $\tau_A^{1/2} \sim F^{-1/2}$. Assim, quando um dímero é depositado, cria um poro de altura da ordem de $F^{-1/2}$. Uma análise da geometria dos depósitos no regime de baixas porosidades mostra que os poros têm uma excentricidade alta, alongados no eixo vertical [64]; portanto é razoável admitir que a largura dos poros criados pela deposição de um dímero é da ordem da unidade se $F \ll 1$. Com isso, um volume da ordem de $F^{-1/2}$ é criado durante um intervalo de tempo em que da ordem de F^{-1} partículas são depositadas; a porosidade deve conseqüentemente ser da ordem de $F^{-1/2}/F^{-1}$, o que resulta

$$\rho \sim F^\xi, \quad (6.1)$$

com $\xi = 1/2$, em qualquer dimensão.

A Fig. 6.3 mostra curvas log-log da porosidade ρ versus F . Os pontos têm excelente ajuste à Eq. 6.1 na região de escala, e confirmam o expoente $\xi = 1/2$. A extensão da teoria de escala para o modelo, confirmada numericamente, mostra que ρ escala com $F \ll 1$ de forma bem definida, sendo F o parâmetro que controla diretamente a taxa com que as correlações entre colunas vizinhas

Figura 6.3: Porosidade DBB em $d = 3$. A figura mostra duas curvas de porosidade $\log \rho$ versus $\log F$ para DBB nos tamanhos $L = 256$ (\square) e $L = 128$ (\triangle). O ajuste linear dos quatro primeiros pontos (menores valores de F) dá $\xi = 0.503 \pm 0.003$ (v. Eq. 6.1); o coeficiente angular da linha cheia mostrada na figura é $1/2$.



se espalham pela superfície. Isto indica que a dinâmica na interface pode ser usada de forma simples para se obterem as propriedades dos agregados porosos.

6.2 Geometria da Superfície Interna

Para estudar a morfologia da superfície interna do depósito (que inclui overhangs e buracos), dividimos o depósito em caixas de lado ℓ , e contamos o número N de caixas que contêm ao menos 1 sítio de superfície. Um sítio de superfície é um sítio ocupado pelo sólido vizinho ao agregado de buracos percolante. A área de superfície por unidade de área de substrato é

$$\frac{N}{L^2} = G(\ell, \theta), \quad (6.2)$$

ou seja, é função do recobrimento¹ θ e da escala de comprimento ℓ .

Os sítios se correlacionam à medida que θ cresce, e esperamos [9] que a superfície escale em escalas de comprimento menores que ξ , onde

$$\xi \sim \theta^n \quad (6.3)$$

é o cutoff superior para comportamento auto-afim da superfície²; n é denominado expoente de *coarsening*. No modelo DBB, os poros são muito conectados a baixas porosidades (Fig. 6.2) e a máxima escala em que comportamento auto-afim é observado é limitada apenas pela altura média do depósito, que deve ser proporcional ao recobrimento θ , se θ for suficientemente pequeno. Isto leva a $n \approx 1$ para DBB (o mesmo valor é obtido para o modelo de deposição balística [9]).

¹O recobrimento é proporcional ao tempo de deposição; na unidade de tempo adotada (v. Sec. 2.1), é exatamente igual.

²Obviamente, $\ell = a$, onde a é o parâmetro de rede, é o cutoff inferior natural para que scaling seja observado.

Se as flutuações na superfície se dão em todas as escalas, a superfície é auto-afim sob reescalas apropriadas de comprimento e tempo; operando as transformações

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &\rightarrow b\mathbf{x}, \\ t &\rightarrow bt \end{aligned}$$

devemos ter

$$N \rightarrow b^2 N(b\ell, b\theta).$$

Fazendo $b = \theta^{-1}$, e exigindo que N seja invariante de escala, obtemos

$$N \sim \theta^{-2} L^2 g\left(\frac{\ell}{\theta}\right), \quad (6.4)$$

onde $g(x) \sim G(x, 1)$ é uma função de escala que deve satisfazer $g(x) \sim x^{-2}$ se $x \gg 1$, e $g(x) \sim x^{-D_f}$, se $x \ll 1$. O expoente D_f é a *dimensão fractal* da superfície.

A Fig. 6.4 mostra curvas log-log de $N\theta^2 L^{-2}$ contra o inverso do recobrimento reescalado, ℓ/θ , para 2 valores da probabilidade F . Na região de escala ($\ell/\theta \ll 1$), esperamos que $g(\ell/\theta) \sim (\ell/\theta)^{-D_f}$ (Eq. 6.4). O ajuste linear das curvas na Fig. 6.4 nessa região resulta $D_f \approx 2.95$.

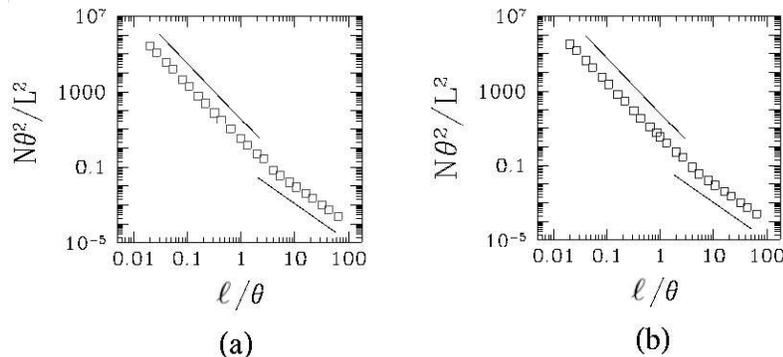
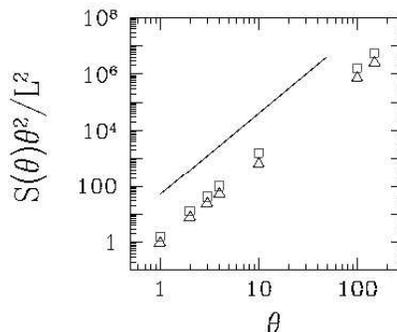


Figura 6.4: Contagem de caixas de superfície BBD. As figuras mostram gráficos log-log de área de superfície reescalada $N\theta^2/L^2$ versus ℓ/θ para (a) $F = 0.10$ e (b) $F = 0.30$. A partir do ajuste linear na região $\ell/\theta \ll 1$ obtemos (a) $D_f = 2.95 \pm 0.04$ e (b) $D_f = 2.95 \pm 0.01$; Em escalas maiores que a altura média da interface ($\ell/\theta \gg 1$), a dimensionalidade da superfície é 2 ± 10^{-11} . As linhas cheias indicam as retas de ajuste nas regiões $\ell \ll \theta$ e $\ell \gg \theta$; nas duas figuras, $L = 256$, $0 < \ell < 256$ e $0 < \theta \leq 150$.

A Fig. 6.5 mostra curvas log-log da área da superfície interna, $S(\theta) = N(1, \theta)$ para 2 valores valores de F . Pela Eq. 6.4, esperamos que a superfície interna reescalada $S(\theta)\theta^2/L^2$ escale como θ^{D_f} . O ajuste linear das curvas na Fig. 6.5 resulta em D_f no intervalo $[2.9, 3]$, e indica que a superfície interna, que inclui

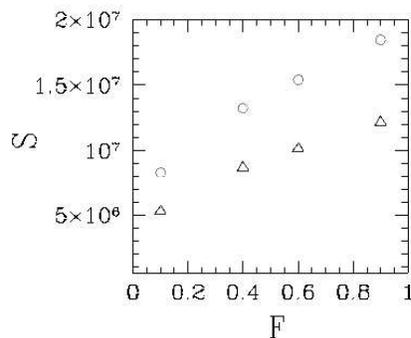
overhangs, é auto-afim mesmo a baixos recobrimentos, onde a interface entre o agregado e o ar não o é (v. *transiente*).

Figura 6.5: Área de superfície DBB. A figura mostra curvas log-log de $S(\theta)\theta^2/L^2$ versus θ para $F = 0.10$ (\triangle) e $F = 0.60$ (\square), e $L = 256$. Pelo ajuste linear dos pontos, obtemos $D_f = 2.94 \pm 0.06$ e $D_f = 2.9979 \pm 0.0003$, respectivamente.



A Fig. 6.6 mostra curvas de superfície interna *versus* F a θ fixo, no intervalo $[0, 1]$. Estas curvas mostram que a superfície interna S é uma função monótona do parâmetro F , em contraste com o observado na Ref. [64, 66] (v. reprodução na Fig. 4.6). A diferença entre os nossos resultados e os anteriores pode ser explicada pela variação do recobrimento nas medidas de S realizadas por Tarafdar e Roy [64] e por Karmakar *et al* [66]. Nestas medidas, o depósito é crescido até que a porosidade atinja o valor limite ρ_0 (Sec. 4.5); no entanto, o valor $\theta = \theta_0$ do recobrimento necessário para que isso ocorra *decrece* com F , para um dado L fixo, como confirmamos através de simulações do modelo. As curvas da Fig. 4.6 podem compreender um intervalo de variação de θ que pode chegar a ser da ordem de 100 para o tamanho $L = 256$; a variação de S com θ nesse intervalo (Fig. 6.5) explicaria o decréscimo de $S(F)$ na Fig. 4.6.

Figura 6.6: Área de superfície DBB. A figura mostra curvas de S versus F para $\theta = 100$ fixo (\triangle) e $\theta = 150$ fixo (\circ), no tamanho $L = 256$. As curvas $S(F)$ a θ fixo não apresentam o máximo observado na Fig. 4.6, na Sec. 4.5.



O expoente $D_f \approx 2.9$ obtido para DBB em $d = 3$ é o mesmo para o modelo de deposição balística, e para a competição entre DB e DAR, acima do *crossover* entre as classes de universalidade EW e KPZ, que ocorre para este modelo competitivo em $d > 2$ [80, 81, 9].

Capítulo 7

Conclusões

Fizemos neste trabalho simulações da evolução da altura $h(\mathbf{x}, t)$ dos depósitos, e da estrutura de partículas e buracos (incluindo *overhangs* e a estrutura porosa) para o modelo DBB em $d = 1 + 1$ e $d = 2 + 1$ dimensões (a dimensionalidade do espaço escrita desta forma deixa explícita a dimensionalidade do substrato). Por meio da cuidadosa extrapolação de tamanho e tempo, verificamos que o modelo atende à hipótese de escala generalizada obtida por Horowitz e Albano [60] para modelos de crescimento competitivos em que uma das componentes é a deposição aleatória (Eq. 4.7).

Técnicas sistemáticas de extrapolação dos efeitos de tamanho e tempo finitos, permitiram obter expoentes de escala em bom acordo com os expoentes α, z assintóticos esperados para o modelo, e δ, y previstos por uma teoria escala (Sec. 4.2). Os expoentes de rugosidade α e dinâmico z são bem definidos em $d = 2$ e $d = 3$ para qualquer valor do parâmetro F que controla o regime de porosidade, e remetem o modelo DBB à classe KPZ, em contraste com resultados obtidos anteriormente [66].

Isto estimulou a investigação mais demorada sobre o tema da classe de universalidade do modelo, especialmente nesta dimensionalidade, sob outros aspectos, que abriram algumas novas perspectivas. Para destacar apenas um destes aspectos, citamos a conexão, por uma extensão da teoria de escala apresentada na Sec. 4.2, entre as taxas de deposição de partículas, que são processos que ocorrem na superfície, e a porosidade, para pequenos valores do parâmetro do modelo.

Para confirmar a classe de universalidade do enrugamento dinâmico da superfície, fizemos uma análise complementar das distribuições de rugosidade em regime estacionário, que exibem funções densidade de probabilidade universais [73, 77]. As distribuições de rugosidade do modelo DBB foram comparadas às de outro modelo na mesma classe de universalidade (v. *modelo RSOS* [79]), e as distribuições para diferentes valores de F exibem excelente acordo entre si e com a densidade de probabilidade KPZ esperada para o modelo. Para uma avaliação quantitativa do colapso das distribuições em $d = 3$, onde a densidade de probabilidade exata é desconhecida, obtivemos coeficientes de curtose e assimetria, $Q = 5.54 \pm 0.32$ e $S = 1.70 \pm 0.03$; os mesmos coeficientes têm valores assintóticos $Q = 5.4 \pm 0.3$ e $S = 1.70 \pm 0.02$ para outros modelos na classe KPZ [78], e espera-se que sejam constantes universais [77].

A equação de crescimento associada ao modelo DBB foi estudada, e concluímos que a equação fenomenológica obtida por Horowitz, Monetti e Albano [59, 61] para os modelos competitivos com deposição aleatória é coerente com os expoentes de escala obtidos para o modelo DBB. Em $d = 2$, onde a relação entre os coeficientes da equação de crescimento e as amplitudes de escala é conhecida, verificamos numericamente que o termo cinético λ escala com F com o expoente de escala previsto pela equação fenomenológica, o que fornece suporte adicional à teoria.

Tarafdar *et al* [64, 66] analisaram a geometria do depósito em $d = 2 + 1$, e encontraram um comportamento de curvas de superfície interna como função da porosidade e de F que justificavam a transição dos expoentes de escala a baixas porosidades. Motivados por teorias de escala bem sucedidas que identificam o modelo DBB com a classe KPZ, estudamos a escala da superfície interna do depósito buscando reafirmá-las.

Os depósitos DBB foram analisados valores do parâmetro F no intervalo $[0.02, 0.40]$, e recobrimentos na faixa $[1, 150]$, em cinco tamanhos de substrato $L \leq 256$ em $d = 3$. A superfície interna DBB tem a mesma dimensão fractal obtida para o modelo DB, e para a competição entre DB e DAR nessa dimensionalidade, $D_f \approx 2.9$ [9].

Ainda na análise da estrutura da superfície interna, verificamos que as teorias de escala apresentadas na Sec. 4.2 [62, 57] podem ser estendidas, e fornecem explicação para a escala da porosidade com o parâmetro F no regime $F \ll 1$ em termos dos mecanismos de enrugamento da interface, assim relacionando propriedades da superfície e do *bulk*.

Pela abrangência limitada deste trabalho, o estudo do modelo DBB feito aqui deixa algumas questões abertas, e perspectivas.

Os expoente de rugosidade α pode ser estimado por meio da largura das distribuições de rugosidade quadrática [84], com benefícios para a precisão numérica. Esta nova estimativa de α deve contribuir com a análise da classe de universalidade do enrugamento dinâmico e o efeito dos regimes de porosidade sobre os expoentes e as correções de tamanho finito, embora não se espere que o valor central obtido divirja dos valores KPZ obtidos por meio da rugosidade.

A análise da geometria do depósito mostrou que a dimensão fractal da superfície interna pode ser um parâmetro universal [72], e sugere investigação da estrutura de outros modelos na mesma classe de universalidade. Além disso, a estimativa $D_f \approx 2.9$ é bastante próxima da dimensão de Hausdorff de sistemas físicos reais [85, 86, 87] e pode ser a fonte de novas possíveis aplicações.

Ainda, quando comparamos o modelo DBB com o modelo competitivo DB-DAR, surge a questão da importância do balanço das taxas microscópicas de transição sobre os expoentes de escala assintóticos. As taxas são de alguma maneira parametrizadas por F , embora as equações de crescimento obtidas por Muraca *et al* [47] (Sec. 4.4) não estejam de acordo com dados obtidos de simulações numéricas ou com a teoria de escala para o modelo. A questão emerge porque o modelo DAR, assim como o modelo DA, gera depósitos compactos (livres de buracos), mas apenas o modelo DB-DAR exhibe *crossover* da estrutura para o regime não-fractal da superfície interna [9] a baixas porosidades.

Entender as razões que levam ao *crossover* da estrutura interna certamente levará a uma melhor compreensão da transição entre dinâmicas de enrugamento da interface no modelo DB-DAR [80, 81], e de sua inexistência, no modelo DBB e nos outros modelos competitivos com a deposição aleatória.

Referências Bibliográficas

- [1] James, W. J.: *Advances in Corrosion Science and Technology* vol. 4, Plenum Press, N. Y. (1974).
- [2] Mandelbrot, B.: *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, San Francisco (1982).
- [3] Wolf, D. E.: *Kinetics of Ordering and Growth at Surfaces*, (ed. Lagally, M.), Plenum Press, N. Y. (1990).
- [4] Barabási, A.-L. e Stanley, H. E.: *Fractal Concepts in Surface Growth*, N.Y., Cambridge University Press (1995).
- [5] Vold, M. J.: *Coll. Sci.* **14**, 168 (1959).
- [6] Vold, M. J.: *J. Phys. Chem.* **63**, 1608 (1959).
- [7] Pettijohn, F. J.: *Sedimentary Rocks*, CBS Publ., Delhi (1984).
- [8] Chillingarian, G. V.: *Compactional Diagenesis in NATO ASI Series C*, vol. 115, *Sediment Diagenesis* (eds. Parker, A. e Selwood, B. W.), D. Reidel, Dordrecht (1987).
- [9] Yu, J. e Amar, J. G.: *Phys. Rev. E* **65**, 060601 (2002).
- [10] Goldenfeld, N.: *Frontiers of Physics*, vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley Pub. Co. (1992).
- [11] Grossmann, B., Guo, H. e Grant, M.: *Phys. Rev. A* **43**, 1727 (1991).
- [12] Aarão Reis, F. D. A.: *Phys. Rev. E* **63**, 056116 (2001).
- [13] Family, F. e Vicsek, T.: *J. Phys. A: Math. Gen.* **18**, L75.
- [14] Griffiths, R. B. e Wheeler, J. C.: *Phys. Rev. A* **2**, 1047 (1970).
- [15] Chandler, D.: *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, N.Y., Oxford University Press (1987).

- [16] Cardy, J.: *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press (1996).
- [17] Stanley, H. E.: *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford, Oxford University Press (1971).
- [18] Peitgen, H.-O., Jügens, H. e Saupe, D.: *Chaos and Fractals: New Frontiers of Science*, N.Y., Springer-Verlag (1992).
- [19] Family, F. e Vicsek, T.: *Dynamics of Fractal Surfaces*, World Scientific, Singapore (1991).
- [20] Stanley, H. E.: *Fractal Concepts for Disordered Systems: The Interplay of Physics and Geometry in NATO ASI Series B: Physics* vol. 133, *Scaling Phenomena in Disordered Systems* (eds. Pynn, R. e Skjeltorp, A.), N.Y., Plenum Press (1985).
- [21] Reif, F.: *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill, N.Y. (1965).
- [22] Barber, M. N.: *Finite Size Scaling in Phase Transitions And Critical Phenomena*, vol. 8 (eds. Domb, C. e Lebowitz, J. L.), U.K., Academic Press (1972).
- [23] Fisher, M. E. e Ferdinand, A. E.: *Phys. Rev. Lett.* **19**, 169 (1967).
- [24] Fisher, M. E. e Barber, M. N.: *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
- [25] Krug, J.: *Adv. Phys.* **46**, 139 (1997).
- [26] Fisher, M. E.: *Rev. Mod. Phys.* **70**, 653 (1998).
- [27] Aarão Reis, F. D. A.: *Phys. Rev. E* **69**, 021610 (2004).
- [28] Aarão Reis, F. D. A.: *Physica A* **316**, 250 (2002).
- [29] Hagston, W. E. e Ketterl, H.: *Phys. Rev. E* **59**, 2699 (1999) .
- [30] Katzav, E. e Schwartz, M.: *Phys. Rev. E* **70**, 061608 (2004).
- [31] Vvedenski, D. D., Zangwill, A., Luse, C. N. e Wilby, M. R.: *Phys. Rev. E* **48**, 852 (1993).
- [32] Vvedenski, D. D.: *Phys. Rev. E* **67**, 025102(R) (2003).
- [33] Costanza, G.: *Phys. Rev. E* **55**, 6501 (1997).

- [34] Braunstein, L., Buceta, R. C., Archubi, C. D. e Costanza, G.: *Phys. Rev. E* **62**, 3920 (2000).
- [35] Edwards, S. F. e Wilkinson, D. R.: *Proc. R. Soc. London A* **381**, L17 (1982).
- [36] Nattermann, T. e Tang, L-H.: *Phys. Rev. A* **45**, 7156 (1992).
- [37] Family, F.: *J. Physica A* **18**, L75 (1985).
- [38] Kardar, M., Parisi, G. e Zhang, Y.-C.: *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
- [39] Medina, E., Hwa, T., Kardar, M. e Zhang, Y.-C.: *Phys. Rev. A* **59**, 3053 (1989).
- [40] Forster, D., Nelson, D. R. e Stephen, M. J.: *Phys. Rev. A* **16**, 732 (1977).
- [41] Chin, C.-S., e den Nijs, M.: *Phys. Rev. E* **59**, 2633 (1999).
- [42] van Kampen, N. G.: *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam (1981).
- [43] Kurtz, T. G.: *Math. Prog. Stud.* **5**, 67 (1976).
- [44] Kurtz, T. G.: *Stoch. Proc. Appl.* **6**, 223 (1978).
- [45] Fox, R. F., Keizer, J.: *Phys. Rev. A* **43**, 1709 (1991).
- [46] Haselwandter, C. A., Vvedenski, D. D.: *Phys. Rev. E* **73**, 040101-1 (2006).
- [47] Muraca, D., Braunstein, L. A., Buceta, R. C.: *Phys. Rev. E* **69**, 065103(R) (2004).
- [48] Vvedenski, D. D.: *Phys. Rev. E* **68**, 010601(R) (2003).
- [49] Tokihiro, T., Takahashi, D., Matsukidaira, J. e Satsuma, J.: *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3247 (1996).
- [50] Bantay, P. e Janosi, I. M.: *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2058 (1992).
- [51] Predota, M. e Kotrla, M.: *Phys. Rev. E* **54**, 3933 (1996).
- [52] Evans, J. W., Thiel, P. A. e Bartelt, M. C.: *Surf. Sci. Rep.* **61**, 1 (2006).
- [53] Wang, W. e Cerdeira, H.: *Phys. Rev. E* **52**, 6308 (1995).
- [54] El-Nashar, H. F. e Cerdeira, H.: *Phys. Rev. E*, 6149 (2000).
- [55] Drossel, B. e Kardar, M.: *Phys. Rev. Lett* **85**, 614 (2000).

- [56] Kotrla, M., Slanina, F. e Predota, M.: *Surf. Sci.* **402**, 249 (1998).
- [57] Aarão Reis, F. D. A.: *Phys. Rev. E* **73**, 021605 (2006).
- [58] Kolakowska, A., Novotny, M. A. e Verma, P. S.: cond-mat/0509668 (2005).
- [59] Horowitz, C. M., Monetti, R. A. e Albano, E. V.: *Phys. Rev. E* **63**, 66132 (2001).
- [60] Horowitz, C. M. e Albano, E. V.: *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** 357 (2001)
- [61] Horowitz, C. M. e Albano, E. V.: *Eur. Phys. J. B* **31**, 563 (2003).
- [62] Braunstein, L. A. e Lam, C.-H.: *Phys. Rev. E* **72**, 026128 (2005).
- [63] Amar, J. G., Family, F.: *Phys. Rev. A* **45**, R3373 (1992).
- [64] Tarafdar, S. e Roy, S.: *Phys. B* **254**, 28 (1998).
- [65] Dasgupta, R., Roy, S. e Tarafdar, S.: *Physica A* **275**, 22 (2000).
- [66] Karmakar, R., Dutta, T., Lebovka, N. e Tarafdar, S.: *Physica A* **348**, 236 (2005).
- [67] Vuolo, J. H.: *Fundamentos da Teoria de Erros* (2^o ed.), Edgar Blücher (1992).
- [68] Sahimi, M.: *Rev. Mod. Phys.* **65**, 1393 (1993).
- [69] Katz, A. J. e Thomsom, A. H.: *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1325 (1985).
- [70] Krug, J. e Meakin, P.: *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, L987 (1990).
- [71] Stauffer, D. Aharony, A: *Introduction to Percolation Theory*, Taylor and Francis (2nd ed.), London (1992).
- [72] Silveira, F. A., Aarão Reis, F. D. A.: a ser submetido em breve.
- [73] Foltin, G., Oerding, K., Rácz, Z., Workman, R. L. e Zia, R. K. P.: *Phys. Rev. E* **50**, R639 (1994).
- [74] Plischke, M. e Rácz, Z.: *Phys. Rev. E* **50**, 3589 (1994).
- [75] Meakin, P., Ramanlal, P., Sander, L. M. e Ball, R. C.: *Phys. Rev. A* **34**, 5091 (1986).
- [76] Sander, L. M. e Yan, H.: *Phys. Rev. A* **44**, 4885 (1991).
- [77] Rácz, Z. e Plischke, M.: *Phys. Rev. E* **50**, 3530 (1994).

- [78] Aarão Reis, F. D. A.: *Phys. Rev. E* **72**, 032601 (2005).
- [79] Kim, J. M. e Kosterlitz, J. M.: *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2289 (1989).
- [80] Pellegrini, Y. P. e Julien, R.: *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1745 (1990).
- [81] Yan, H., Kessler, D. e Sander, L. M.: *Phys. Rev. Lett.* **64**, 956 (1990).
- [82] Hoshen, J. e Kopelman, R.: *Phys. Rev. B* **14**, 3438 (1976).
- [83] Hoshen, J., Berry, M. W. e Minser, K. S.: *Phys. Rev. E* **56**, 3438 (1997).
- [84] Aarão Reis, F. D. A.: *Physica A* **364**, 190 (2006).
- [85] Krohn, C. E., e Thompson, A. H.: *Phys. Rev. B* **33**, 6366 (1986).
- [86] Radlinski, A. P., Radlinska, E. Z., Agamalian, M., Wignall, G. D., Lindner, P. e Randl, O. G.: *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3078 (1999).
- [87] Gomez-Rodrigues, J. M., Asenjo, A., Salvarezza, R. C. e Baro, A. M.: *Ultramicroscopy* **42–44**, 1321 (1992).

Lista de Figuras

2.1	DB em $d = 2$ dimensões. Uma posição é escolhida aleatoriamente acima do substrato, e uma partícula “cai” verticalmente, se agregando ao primeiro sítio com um primeiro vizinho ocupado. A figura ilustra as posições de agregação A', B' das partículas incidentes A, B . Extraída de [4].	6
2.2	Agregado DB obtido pela deposição de 35000 partículas, em $d = 2$ dimensões. O substrato horizontal tem tamanho $L = 200$, em unidades de rede. Cada camada, identificada pelos tons claro e escuro, indica a deposição de 2500 partículas; assim, é possível acompanhar, qualitativamente, a evolução da rugosidade com o tempo. Extraída de [4].	7
2.3	Corte vertical de um depósito DB em $d = 3$ dimensões. O substrato, plano horizontal, tem tamanho 128×128 , em unidades de rede. A figura foi obtida pela deposição de 4480 partículas. Extraída de [9].	8
2.4	A figura (a) mostra a evolução temporal da rugosidade em $d = 2$ para deposição balística em um substrato de tamanho $L = 256$. A figura (b) mostra $\log W$ versus $\log t$ para os tamanhos de substrato $L = 128$ a $L = 2048$, também em $d = 2$ dimensões.	9
2.5	Curvas $W(L, t)/L^\alpha$ versus t/L^z para os tamanhos de substrato $L = 128$ a 2048 em $d = 2$	10

- 2.6 Nesta figura, $h(x)$ (curva (a)) é reescalada por um fator $b = 4$ no eixo \overline{Ox} , mantendo a escala do eixo \overline{Oh} (curva (b)). Em (b), 3/4 da curva original foram deslocados para a direita, e se encontram fora do gráfico. Note que as duas curvas são, mesmo por inspeção visual, bastante diferentes ((b) é bem mais lisa). A curva (c) mostra a mesma curva (a), agora reescalada por um fator $b = 4$ em ambos os eixos. Novamente, obtemos duas curvas diferentes mesmo a olho nu ((c) é bem mais rugosa). Na curva (d), a curva (a) é reescalada por um fator $b = 4$ no eixo \overline{Ox} e por um fator $b^\alpha = \sqrt{4} = 2$ no eixo \overline{Oh} (que são os fatores de escala apropriados). As curvas (a) e (d) são estatisticamente equivalentes (p.ex., têm as mesmas rugosidade e expoente de auto-afinidade χ) e, conseqüentemente, muito mais parecidas. As regiões sombreadas marcam uma área sob a curva (a), e sua contrapartida devidamente reescalada em (d). Extraída de [18] 11
- 2.7 A Figura mostra duas possibilidades típicas de agregação segundo a regra de deposição do modelo DA. Na deposição aleatória, uma partícula “cai” verticalmente, até atingir o topo da coluna \mathbf{x} escolhida em t , onde agrega-se irreversivelmente, incrementando a altura $h(\mathbf{x}, t)$ da coluna. Extraída de [4]. 12
- 2.8 Agregado DA obtido pela deposição de 16000 partículas, em $d = 2$. O substrato tem tamanho $L = 100$, em unidades de rede. Cada camada, identificada pelos tons claro e escuro, indica a deposição de 4000 partículas. Extraída de [4]. 13
- 2.9 Inclinações sucessivas $s(L, t)$ de $\log W$ contra $\log t$ para os tamanhos de substrato L_1 (\square) e L_2 (\triangle), com $L_1 > L_2$. Esta figura é apenas uma ilustração (não foi obtida a partir de dados de simulações) e mostra, por exagero, as principais características deste tipo de gráfico, como a região transiente e o *crossover* para o regime de saturação (v. Fig. 2.4). 16
- 2.10 Expoentes efetivos β_L versus $L^{-\lambda}$. Como não há argumento para prever seu valor, λ é escolhido de forma a maximizar a correlação linear dos pontos. Nesta figura, β_L foi estimado para os tamanhos de substrato $L = 2^n$ ($n = 4, \dots, 10$) em $d = 2$, com $\lambda = 0.28$. Extraído de [12] 17
- 2.11 Expoentes efetivos $\alpha(L)$ versus $L^{-\Delta}$, obtidos de dados de deposição balística em $d = 2$. Nesta figura, $\Delta = 0.58$; a reta é um ajuste de mínimos quadrados dos primeiros cinco pontos do gráfico (maiores valores de L). Os dados de rugosidade de saturação usados nesta figura foram extraídos de [12]. 17

- 2.12 A figura indica um método simples de estimar t_{\times} , pela intersecção de duas retas de ajuste nas regiões de alta correlação linear nos regimes de crescimento e estacionário. Extraído de [4]. 18
- 2.13 Evolução temporal do desvio $\Delta W(L, t)$ para DB em $d = 2$, para os tamanhos $L = 512$ (a) e $L = 64$ (b). O coeficiente linear da reta de ajuste na região de alta correlação linear é $1/\tau$. O valor de τ obtido por ajuste linear direto é indicado para cada tamanho. 19
- 2.14 Expoentes efetivos $z(L)$ versus $L^{-\sigma}$, obtidos da deposição balística em $d = 2$, com $\sigma = 1$. Os pontos em (a) foram obtidos a partir de tempos característicos τ_k , calculados usando $k = 0.6$; os pontos em (b), usando $k = 0.8$ (Eq. 2.24). 19
- 3.1 Efeitos da tensão superficial sobre $h(\mathbf{x}, t)$. Considere uma flutuação de altura com o perfil mostrado em (a); em (b), mostramos a contribuição $\nu \nabla^2 h$ correspondente à taxa de variação da altura e, em (c), o perfil resultante num instante posterior. O efeito do termo laplaciano é o de reduzir a altura do ponto mais alto e redistribuí-la pelos lados do perfil, conservando a “massa” (área sob a curva, em $d = 2$). Extraído de [4]. 26
- 3.2 No modelo DAR, as partículas depositadas segundo a regra DA podem “relaxar” para os sítios vizinhos de menor altura. A relaxação de superfície cria correlações entre vizinhos e, eventualmente, leva à saturação da rugosidade. Extraído de [4]. 28
- 3.3 Depósito DAR em $d = 2$ obtido pela deposição de 35000 partículas, em um substrato de tamanho $L = 100$. Cada camada, identificada pelos tons claro e escuro, indica a deposição de 3500 partículas. O depósito DAR é compacto, e a interface é mais suave que a obtida por DB (Fig. 2.2). Extraído de [4]. 28
- 3.4 Efeitos do termo não-linear sobre $h(x, t)$. Considere uma flutuação de altura com o perfil em (a); em (b), mostramos a contribuição do termo $(\lambda/2)(\nabla h)^2$ à $\partial h/\partial t$ em x e, em (c), o perfil resultante num instante posterior. O efeito do termo $(\nabla h)^2$ é o de reduzir a curvatura adicionando “massa” aos lados do perfil, gerando excesso de velocidade. Extraído de [4]. 29
- 3.5 Origem do termo não-linear na Eq. KPZ. Descrever interfaces que apresentam mecanismos de crescimento lateral foi a motivação original da adição do termo $(\nabla h)^2$ ao termo de tensão superficial na equação de crescimento [38]. Extraído de [39]. 31

- 4.1 Gráficos W versus t para DAR-DA em $d = 2$. Em (a), $L = 256$ é fixado, e p varia como $p = 2^i/100$, com $i = 0, \dots, 6$; em (b), $p = 0.16$ é fixado, e L varia como $L = 2^j$, com $j = 5, \dots, 10$. Extraído de [59]. A reta mostrada em (b) tem coeficiente angular $\beta = 1/4$ 38
- 4.2 Gráficos W versus t para DB-DA. Em (a), $L = 256$ é fixado, e p varia como $p = 2^i/100$, com $i = 0, \dots, 6$; em (b), $p = 0.16$ é fixado, e L varia como $L = 2^j$, com $j = 5, \dots, 10$. Extraído de [60]. A reta mostrada em (b) tem coeficiente angular $\beta = 1/3$ 39
- 4.3 DBB em $d = 2$. A figura ilustra as posições de agregação A', B' de um dímero (A) e uma partícula (B). A deposição de um dímero gera correlações entre vizinhos por um mecanismo análogo à deposição de uma partícula do tipo A na deposição balística (v. Fig 2.1). O modelo DBB é um modelo competitivo entre a deposição de dímeros, análoga à deposição balística, e a deposição aleatória, com parâmetro F 49
- 4.4 Variação da porosidade com F em $d = 3$. A linha sólida mostra o ajuste logarítmico; pontos e linha tracejada, dados das simulações em depósitos de tamanho 150^3 . Extraído de [64]. 49
- 4.5 Secção reta vertical de depósitos DBB em $d = 3$, para (a) $F = 1$ e (b) $F = 0.20$ em um substrato de volume 128^2 . A baixas porosidades, os poros têm uma excentricidade grande na direção vertical, mas a conectividade lateral dos poros é muito mais baixa. 50
- 4.6 Área superficial e área superficial por sítio, ou área superficial específica para depósitos DBB em $d = 3$. A Figs. mostram gráficos de (a) área superficial versus F [66], e (b) área superficial específica versus ρ_0 [64]. A Fig. (b) foi obtida de depósitos de tamanho $L = 150$ em $d = 3$ 51
- 4.7 Expoente dinâmico z obtido como função do parâmetro F para o modelo DBB em $d = 3$. A figura mostra um degrau, que Ref. [66] associa à uma transição de conectividade dos poros do depósito. 51
- 5.1 DBB em $d = 2$ e $d = 3$. As figuras (a) e (b) mostram as famílias de curvas $W(t)$ para $F = 0.10$ fixo e $L = 64$ fixo em $d = 3$; as figuras (c) e (d), curvas $W(t)$ para $F = 0.30$ fixo e $L = 32$ em $d = 2$. V. comentários no texto. 54
- 5.2 DBB em $d = 2$ e $d = 3$. A figura (a) mostra um gráfico log-log de W_{sat} versus L para $d = 2$ e probabilidades $F = 0.10$ (\square), 0.20 (\triangle) e 0.40 (\circ); a linha reta tem coeficiente angular $1/2$. A figura (b) mostra a mesma curva para $d = 3$; a linha reta mostrada nesta figura tem coeficiente angular 0.36 (v. comentários no texto). 55

- 5.3 DBB em $d = 2$ e $d = 3$. A figura mostra os expoentes efetivos $\alpha(L, F)$ versus $L^{-\Delta}$ para o modelo DBB em $d = 2$ e $F = 0.10$ fixo (\square) e para $d = 3$ e $F = 0.08$ fixo (\triangle). O ajuste de mínimos quadrados, representado pelas linhas cheias, resulta $\alpha(F = 0.10) \approx 0.51$ em $d = 2$ e $\alpha(F = 0.08) \approx 0.38$ em $d = 3$. A correção mais adequada à escala do expoente α é $\Delta = 0.5$ em $d = 2$ e 3 (v. Eq. 5.2). 56
- 5.4 Expoentes de rugosidade DBB em (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$. Os $\alpha(F)$ não diferem mais que as barras de erro dos valores KPZ em $d = 2$ ($\alpha = 1/2$, exato) e $d = 3$ ($\alpha \approx 0.38$) para nenhum valor da probabilidade F . . . 57
- 5.5 DBB em $d = 2$ e $d = 3$. A figura (a) mostra um gráfico log-log de τ_k versus L para $d = 2$ e probabilidades $F = 0.06$ (\triangleright), 0.10 (\square), 0.20 (\triangle) e 0.40 (\circ); a linha reta tem coeficiente angular $3/2$. A figura (b) mostra a mesma curva para $d = 3$; a linha reta mostrada nesta figura tem coeficiente angular 1.66 (v. comentários no texto). Para calcular τ_k , usamos $k = 0.8$ na Eq. 2.22. 58
- 5.6 DBB em $d = 2$ e $d = 3$. A figura mostra expoentes efetivos $z(L, F)$ versus $L^{-\sigma}$, com $\sigma = 1$, extrapolados para $L \rightarrow \infty$ para o modelo DBB em $d = 2$ e $F = 0.06$ (∇) fixo e $d = 3$ e $F = 0.10$ fixo (\circ); as linhas cheias são retas de mínimos quadrados para os dois conjuntos de pontos. O parâmetro k é escolhido de forma a minimizar as flutuações de $z(L, F)$ na região de scaling. Os pontos em $d = 2$ mostrados na figura foram obtidos a partir de tempos característicos τ_k usando $k = 0.9$; os pontos em $d = 3$, usando $k = 0.8$ 58
- 5.7 Expoentes dinâmicos DBB em (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$. Os $z(F)$ não diferem mais que as barras de erro dos valores KPZ em $d = 2$ ($z = 3/2$, exato) e $d = 3$ ($z \approx 1.6$) para qualquer valor da probabilidade F 59
- 5.8 Amplitude de escala da rugosidade DBB. A figura mostra $A(L, F)$ versus $L^{-\Omega}$ para os valores $F = 0.20$ (\circ) e $F = 0.40$ (∇) em $d = 2$, e $F = 0.20$ (\square) e $F = 0.40$ (\triangle) em $d = 3$, e retas de mínimos quadrados que ajustam os maiores valores de L . Os melhores ajustes foram obtidos usando $\Omega = 0.5$ em $d = 2$ e $\Omega = 0.8$ em $d = 3$. Os expoentes de rugosidade usados na extrapolação ($\alpha = 0.5$ em $d = 2$ e $\alpha = 0.37$ em $d = 3$) foram obtidos na Sec. 5.1.1. 61
- 5.9 Expoente δ DBB. A figura mostra as extrapolações dos expoentes efetivos $\delta(F)$ em $d = 2$ (a) e $d = 3$ (b); as linhas cheias são ajustes de mínimos quadrados para os 3 e 4 primeiros pontos (menores valores de F) em (a) e (b), respectivamente. Pelo ajuste nas figuras, obtemos $\delta \approx 0.5$ em ambas as dimensionalidades (v. texto). 61

- 5.10 Expoente y DBB. As figuras mostram as curvas $\log[B(L, F)]$ versus $\log(F)$ a L fixo em (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$. A figura (a) mostra curvas para os tamanhos $L = 64$ (\square), 128 (\triangle), 256 (\circ) e 512 (∇); a figura (b), para os tamanhos $L = 64$ (\triangle), 128 (\square), 256 (\circ) e 512 (∇). As curvas se superpõem e, para maior clareza dos gráficos, foram deslocadas verticalmente umas das outras. As linhas retas têm coeficientes angulares (a) -1 e (b) -1.10 , e resultam do ajuste de mínimos quadrados destas curvas (v. texto). Os valores de k que resultam nos melhores ajustes são $k = 0.8$ em $d = 2$ e $0.7 \leq k \leq 0.9$ em $d = 3$ 62
- 5.11 Velocidade de crescimento da altura média DBB em $d = 2$. A Figura mostra curvas $v(L, F)$ versus $1/L$ a F fixo para as probabilidades $F = 0.10$ (∇), $F = 0.08$ (\triangleright) e $F = 0.06$ (\square). O coeficiente linear do ajuste por reta na das curvas é igual à razão $G = D\lambda/\nu$ (Eq. 5.15). 63
- 5.12 Expoente θ DBB. A figura mostra inclinações sucessivas $\Theta(F)$ versus F^ϵ . O expoente ϵ é ajustado de forma a maximizar a correlação linear dos pontos na região de escala (Eqs. 5.16 e 5.17). O melhor ajuste dos pontos, indicado pela linha cheia na figura, resulta $\theta = 0.53 \pm 0.06$, com $\epsilon = 1.55$ 63
- 5.13 Distribuições de rugosidade DBB. As figuras mostram gráficos log-linear de σP_L versus $(w_2 - \langle w_2 \rangle)/\sigma$ em (a) $d = 2$, para o tamanho $L = 128$ e probabilidades $F = 0.06$ (\triangle) e $F = 0.10$ (\square), e em (b) $d = 3$ para o tamanho $L = 128$ e probabilidades $F = 0.06$ (\triangle) e $F = 0.20$ (\square). A linha cheia indica, nas duas figuras, a distribuição reescalada de rugosidades do modelo RSOS. 65
- 6.1 Porosidade para DBB em $d = 3$. A figura mostra a porosidade ρ versus F para o tamanho $L = 256$ e recobrimento fixo. Os pontos mostrados nesta figura se ajustam bem à curva na Fig. 4.4. 67
- 6.2 Percolação da fase porosa para DBB em $d = 3$. A figura mostra (a) a probabilidade de percolação da fase porosa P versus F , para $L = 256$ fixo, e (b) P versus a porosidade ρ para depósitos DBB nos tamanho $L = 256$ (\triangleright), $L = 128$ (\square), $L = 64$ (\triangle) e $L = 32$ (\circ). Em (b), é possível ver que $\rho_c \approx 0.20$ ($F_c \approx 0.04$, na Fig. (a)) se $L > 256$. As curvas em (a) e (b) são curvas de recobrimento fixo. 68
- 6.3 Porosidade DBB em $d = 3$. A figura mostra duas curvas de posidade $\log \rho$ versus $\log F$ para DBB nos tamanhos $L = 256$ (\square) e $L = 128$ (\triangle). O ajuste linear dos quatro primeiros pontos (menores valores de F) dá $\xi = 0.503 \pm 0.003$ (v. Eq. 6.1); o coeficiente angular da linha cheia mostrada na figura é $1/2$ 69

- 6.4 Contagem de caixas de superfície BBD. As figuras mostram gráficos log-log de área de superfície reescalada $N\theta^2/L^2$ versus ℓ/θ para (a) $F = 0.10$ e (b) $F = 0.30$. A partir do ajuste linear na região $\ell/\theta \ll 1$ obtemos (a) $D_f = 2.95 \pm 0.04$ e (b) $D_f = 2.95 \pm 0.01$; Em escalas maiores que a altura média da interface ($\ell/\theta \gg 1$), a dimensionalidade da superfície é 2 ± 10^{-11} . As linhas cheias indicam as retas de ajuste nas regiões $\ell \ll \theta$ e $\ell \gg \theta$; nas duas figuras, $L = 256$, $0 < \ell < 256$ e $0 < \theta \leq 150$ 70
- 6.5 Área de superfície DBB. A figura mostra curvas log-log de $S(\theta)\theta^2/L^2$ versus θ para $F = 0.10$ (\triangle) e $F = 0.60$ (\square), e $L = 256$. Pelo ajuste linear dos pontos, obtemos $D_f = 2.94 \pm 0.06$ e $D_f = 2.9979 \pm 0.0003$, respectivamente. 71
- 6.6 Área de superfície DBB. A figura mostra curvas de S versus F para $\theta = 100$ fixo (\triangle) e $\theta = 150$ fixo (\circ), no tamanho $L = 256$. As curvas $S(F)$ a θ fixo não apresentam o máximo observado na Fig. 4.6, na Sec. 4.5. 71

Lista de Tabelas

4.1	Expoentes de escala δ, y e γ , obtidos a partir de simulações dos modelos DB-DA e DAR-DA. As linhas da tabela verificam a Eq. 4.8 bastante satisfatoriamente. Dados extraídos de [61].	40
4.2	Coefficientes das equações de crescimento para os modelos DAR-DA e DB-DA, obtidas por métodos de scaling (Refs. [59, 61, 62, 57] e Secs. 4.3 e 4.2) e pela passagem ao limite das equações que descrevem os processos microscópicos (Ref. [47] e Sec. 4.4). Pela Eq. 4.11, obtemos $D \sim 1$ a partir da Eq. 4.14 em qualquer dimensão para ambos os modelos. O limite de validade da teoria de escala exposta na Sec. 4.2 é $p \rightarrow 0$, e só podemos comparar os coeficientes obtidos pelos dois métodos nesse limite. Os expoentes entre colchetes são os valores obtidos para δ, y a partir das relações entre as amplitudes de escala (definidas nas Eqs. 4.4 e 4.5) e dos coeficientes ν, λ (Eqs. 4.13 e 4.15); estas relações estão resumidas na segunda coluna.	48
5.1	Assimetria e curtose BBD em $d = 3$. Os valores de S e Q estão de acordo com seus valores KPZ esperados [78], $S \approx 1.7$ e $Q \approx 5.4$	65

Índice Remissivo

- área superficial, 52
- altura média, 7
- amplitude de escala, 37, 55
- assimetria, 64
- auto-afinidade, 10, 43
- box counting, 69
- bulk, 48
- bulk behaviour, 13
- buraco, 49
- classe de universalidade, 23, 59, 73
 - do passeio aleatório, 64
 - EW, 26
 - KPZ, 32, 55
- Clube de Regatas do Flamengo, ii
- coeficientes
 - equação EW, 34, 43, 46
 - equação KPZ, 35, 44, 47
- colapso de dados, 9, 15
- comprimento
 - de correlação ξ , 14
 - de correlação lateral, 14
- conectividade, 48, 49
- correção de tamanho finito, 60, 62
- correções à escala, 15, 56, 63
- correlação linear, 60
- correlações, 12, 45
- crescimento lateral, 28, 31
- crossover, 74
- curtose, 64
- cutoff, 50, 69
- dímeros, 48, 54
- densidade de buracos, 49
- deposição
 - aleatória, 11
 - balística, 6
- diferença de alturas, 37
- dimensão de Hausdorff, 50, 70, 74
- equação
 - de Burgers, 30
 - mestra, 32
- equação de crescimento
 - deposição aleatória, 22
 - EW, 26, 34, 43, 46
 - KPZ, 28, 35, 43, 47
- excesso de velocidade, 29
- expoente
 - δ , 38, 41, 42, 60
 - γ , 38
 - θ , 63
 - y , 38, 41, 42, 60
 - crítico, 9
 - de auto-afinidade, 10, 14
 - de coarsening, 69
 - de crescimento, 8, 15, 55
 - de escala, 9, 10, 15, 40, 48
 - de rugosidade, 8, 17, 55
 - dinâmico, 8, 18, 57
 - efetivo, 16–19, 55
- fator de escala, 10

- fenômenos críticos, 9
flutuação rms, 56, 64, 74
flutuações, 13
fractal, 48
função
 δ de Kroenecker, 35
 auto-afim, 10
 de correlação altura-altura, 10
 de escala, 9, 15
 degrau, 33, 46
 homogênea generalizada, 9
grupo de renormalização, 31
hipótese de escala, 59
 de tamanho finito, 13
 dinâmica, 8, 23
inclinações sucessivas, 15, 19, 55, 57
invariância
 de escala, 30, 43–45
 galileana, 30, 44
kinetic roughening, 14, 73
largura de interface, 7
limiar de percolação, 50, 67
modelo
 de deposição aleatória, 11
 de deposição balística, 6
 de percolação de buracos, 67
 RSOS, 64
modelos correlacionados, 37
momentos da taxa de transição, 32, 46
movimento browniano, 11
overhang, 71
overhangs, 6, 69, 72
paradoxo, ii
passeio aleatório, 10, 40, 63
percolação, 67
permeabilidade, 48
poro, 49
porosidade, 48, 49, 67
porosidade de saturação, 50, 67, 71
power counting, 29
processo markoviano, 32
recobrimento, 71
região de escala, 15
relação de escala, 10, 39, 42
roughening, 7
rounding temperature, 13
rugosidade, 7
rugosidade quadrática, 56, 64
scaling, 8, 15, 39, 41, 43, 44
simetria exata, 30
substrato, 6, 72
superfície interna, 51
taxa de transição, 32, 74
tensão superficial, 24, 26
termo cinético, 29, 62
transição de conectividade, 52, 74
transiente, 8, 16, 37
variável gaussiana, 41
velocidade de crescimento, 62