

ISMAEL SEGUNDO DA SILVA CARRASCO

**EFEITOS DAS CONDIÇÕES INICIAIS NA DINÂMICA DE CRESCIMENTO DE  
INTERFACES**

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

VIÇOSA  
MINAS GERAIS – BRASIL  
2018

**Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da Universidade  
Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa**

T

C313e  
2018 Carrasco, Ismael Segundo da Silva, 1985-  
Efeitos das condições iniciais na dinâmica de crescimento  
de interfaces / Ismael Segundo da Silva Carrasco. – Viçosa, MG,  
2018.

xii, 103 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui apêndice.

Orientador: Tiago José de Oliveira.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 95-103.

1. Modelos matemáticos. 2. Monte Carlo, Método de.  
3. Equações diferenciais estocástica. I. Universidade Federal de  
Viçosa. Departamento de Física. Doutorado em Física. II. Título.

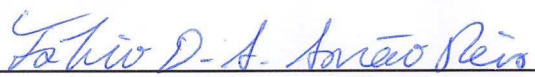
CDD 22. ed. 530.1518

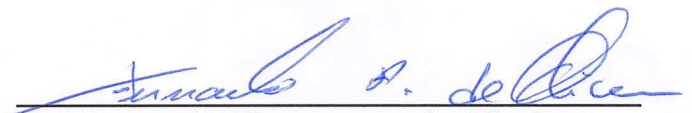
ISMAEL SEGUNDO DA SILVA CARRASCO

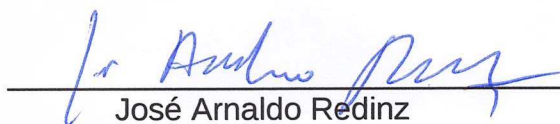
**EFEITOS DAS CONDIÇÕES INICIAIS NA DINÂMICA DE CRESCIMENTO DE  
INTERFACES**


Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.


APROVADA: 06 de abril de 2018.

  
Fabio-David Alves Aarão Reis

  
Fernando Albuquerque de Oliveira

  
José Arnaldo Redinz

  
Silvio da Costa Ferreira Junior  
(Coorientador)

  
Tiago José de Oliveira  
(Orientador)

*“Why are scientists in so many cases so deeply interested in their work? Is it merely because it is useful? It is only necessary to talk to such scientists to discover that the utilitarian possibilities of their work are generally of secondary interest to them. Something else is primary.”*

David Bohm

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a todas as pessoas que fizeram parte da minha vida nesses últimos anos. Aos meus amigos de Viçosa pelos momentos de descontração. Aos alunos da pós-graduação em física pelas diversas discussões interessantes, muitas delas em mesas de bar. Em especial ao Renan pelas discussões (mais sóbrias) relacionadas a dinâmica de interfaces. Gostaria de agradecer também ao Ricardo por me emprestar vários processos no GISC, agilizou bastante a aquisição dos dados. A minha família por todo carinho e apoio, dando a oportunidade de me dedicar integralmente aos estudos. A minha companheira Lucimar pelo amor e pelo “presente” encomendado para agosto.

Expresso aqui meus sinceros agradecimentos ao Tiago por tudo que ele me ensinou ao longo desses anos. Sem a participação dele esta tese não existiria. Agradeço também aos demais professores do departamento, em especial ao Sílvio que acompanha de perto minha formação desde a graduação.

Finalmente, agradeço às agências de fomento à pesquisa, FAPEMIG, CNPq e principalmente a CAPES pela bolsa.

## SUMÁRIO

Lista de Símbolos e Acrônimos	v
Resumo	vii
Abstract	ix
1 Introdução	1
2 Revisão bibliográfica	5
2.1 A dinâmica de interfaces e o equilíbrio termodinâmico	5
2.1.1 A energia de uma interface	6
2.2 Eventos microscópicos em interfaces	6
2.3 Dedução de uma equação geral para a dinâmica de interfaces	8
2.3.1 Equação de movimento via energia livre	8
2.3.2 Dedução via dinâmica dissipativa	11
2.3.3 O ruído e suas propriedades	13
2.4 Enrugamento cinético	14
2.4.1 O expoente da rugosidade $\alpha$ e a morfologia da interface	17
2.5 Classes de universalidade no enrugamento cinético	18
2.5.1 A classe KPZ	20
2.5.2 A classe EW	24
2.5.3 A classe VLDS	24
2.5.4 A classe MH	25
2.5.5 A classe RD	26
2.6 Universalidade além dos expoentes de escala	26
2.6.1 Universalidade da distribuição de alturas	26
2.6.2 Covariâncias espaciais e temporais	30
2.6.3 Distribuição de rugosidade e extremos locais	32
2.7 Geometria versus condição inicial	34
3 Modelos e algoritmos	38
3.1 Modelos discretos da classe KPZ	38

3.2	Modelos discretos da classe EW . . . . .	40
3.3	Modelos discretos da classe VLDS . . . . .	41
3.4	Modelos discretos da classe MH . . . . .	42
3.5	Integração das equações . . . . .	43
3.6	Algoritmo para simulação de interfaces com tamanho lateral variável . . . . .	43
4	Propriedades universais e não universais em crescimentos KPZ em substratos de tamanho lateral variável no tempo . . . . .	46
4.1	Substratos de tamanhos decrescentes . . . . .	46
4.2	Domínios que crescem de forma não linear no tempo . . . . .	52
4.2.1	Resultados para $\gamma < 1/z$ . . . . .	53
4.2.2	Resultados para $\gamma = 1/z$ . . . . .	53
4.2.3	Resultados para $\gamma \geq 1/z$ . . . . .	55
4.2.4	Correções . . . . .	59
4.3	Conclusão . . . . .	60
5	Dependência das classes VLDS, EW e MH com as CI's . . . . .	62
5.1	Universalidade e subdivisão da classe VLDS . . . . .	62
5.1.1	Conexão entre os parâmetros não-universais da equação e os mesuráveis da superfície . . . . .	62
5.1.2	Distribuições de altura . . . . .	63
5.1.3	Covariância espacial e temporal . . . . .	67
5.2	Universalidade e subdivisão das classes EW e MH . . . . .	69
5.3	Modelos com longo comprimento de difusão . . . . .	71
5.4	Conclusão . . . . .	74
6	Distribuições de rugosidade e de extremos locais . . . . .	75
6.1	Distribuições de rugosidade quadrática local . . . . .	75
6.1.1	SLRD para $\xi \gg l$ . . . . .	75
6.1.2	SLRD para $\xi \lll l$ . . . . .	77
6.1.3	SLRD para $1 \ll \xi \ll l$ . . . . .	79
6.2	Distribuição de extremos locais . . . . .	82
6.2.1	LEHD para $1 \ll \xi \ll l$ . . . . .	82
6.2.2	LEHD para $\xi \gg l$ . . . . .	85
6.3	Conclusão . . . . .	87

7	Considerações finais	88
A	Cumulantes da SLRD da classe EW em $d = 1$ e da classe RD	91



## LISTA DE SÍMBOLOS E ACRONISMOS

$a$	constante de espaçamento da rede
$A$	parâmetro não universal associado à amplitude da rugosidade
BD	<i>ballistic deposition</i>
CI	condição inicial
CRSOS	(modelo) <i>conserved restricted solid-on-solid</i>
$C_s$	covariância espacial
$C_t$	covariância temporal
CV	(modelo de) Clarke-Vvedensky
$d$	dimensão da interface
$D$	coeficiente vinculado a amplitude do ruído nas equações estocásticas
DT	(modelo de) Das Sarma e Tamborenea
EW	(classe de) Edward-Wilkinson
$F$	fluxo de partículas
FV	(relação de escala de) Family-Vicsek
GOE	<i>Gaussian Orthogonal Ensemble</i>
GUE	<i>Gaussian Unitary Ensemble</i>
GSE	<i>Gaussian Symplectic Ensemble</i>
GSI	<i>Generic Scale Invariance</i>
$h(x,t)$	altura da superfície no ponto $x$ e no instante $t$
HD	distribuição de altura (Height Distribution)
$K$	Kurtosis: $\langle X^4 \rangle_c / \langle X^2 \rangle_c^2$
KPZ	(classe de) Kardar-Parisi-Zhang
$l$	tamanho de janela
$L_0$	tamanho inicial do substrato/domínio
$L$	tamanho lateral do substrato/domínio
LCM	<i>large curvature model</i>
LADP	(modelo) <i>lateral aggregation of diffusing particles</i>
LEHD	Local Extremal Height Distribution
MAHD	Maximal Height Distribution
MIHD	Minimal Height Distribution
MH	(classe) Mullins-Herring
$N(x,y)$	distribuição normal de média $x$ e variância $y$
PNG	(modelo) <i>polynuclear growth</i>
$R$	erro relativo ou coeficiente de variação
RD	equação/classe de crescimentos totalmente aleatórios
RSOS	modelo <i>restricted solid-on-solid</i>
$S$	<i>Skewness</i>

SLRD	Squared Local Roughness Distribution
SS	(modelo) Single-Step
$t$	tempo
TASEP	(modelo) <i>totally asymmetric exclusion process</i>
TCL	teorema central do limite
$t_x$	tempo de <i>crossover</i> da rugosidade global
$v_\infty$	velocidade assintótica de crescimento
VLDS	(classe de) Villain-Lai-Das Sarma
$w$	rugosidade local (em janela)
$W$	rugosidade global da superfície
$W_{sat}$	rugosidade de saturação
$z$	expoente dinâmico: $\xi \sim t^{1/z}$
$\xi$	comprimento de correlação
$\alpha$	expoente de rugosidade: $W_{sat} \sim L^\alpha$
$\beta$	expoente de crescimento: $W \sim t^\beta$
$\gamma$	expoente do termo de variação do tamanho do substrato: $L = L_0 + \omega t^\gamma$
$\Gamma$	coeficiente do termo estocástico do ansatz
$\eta$	ruído não-conservativo
$\lambda$	coeficiente do termo não-linear na equação KPZ
$\bar{\lambda}$	expoente de decaimento da correlação temporal
$\lambda_4$	coeficiente do termo não-linear da equação VLDS
$\nu$	coeficiente da tensão superficial das equações KPZ e EW
$\nu_4$	coeficiente da derivada de quarta ordem das equações VLDS e MH
$\chi$	variável aleatória do ansatz associada à forma da HD
$\omega$	amplitude termo de variação do tamanho do substrato
$\bar{X}$	média da variável $X$ na amostra
$\langle X \rangle$	média variável $X$ entre amostras
$\langle X^n \rangle_c$	cumulante de ordem $n$ da variável aleatória $X$

## RESUMO

CARRASCO, Ismael Segundo da Silva, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, abril de 2018. **Efeitos das condições iniciais na dinâmica de crescimento de interfaces.** Orientador: Tiago José Oliveira. Coorientadores: Sílvio Costa Ferreira Júnior e Sidiney Geraldo Alves.

A dinâmica de interfaces é um exemplo importante de fenômeno longe do equilíbrio termodinâmico. Essa área tem chamado muita a atenção da comunidade científica recentemente pela verificação de que a classe de universalidade de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) se subdivide de acordo com a geometria da superfície. Nessa subdivisão, as interfaces curvas e planas possuem o mesmo conjunto de expoentes de escala, mas distribuições de altura (HD – Height Distribution) e covariâncias (espaciais e temporais) diferentes. Simulações recentes mostraram que essa mesma subdivisão é observada em sistemas planos com substratos que crescem lateralmente, demonstrando que a curvatura em si não deve ter um papel essencial. O algoritmo utilizado nessas simulações permite estudar diferentes aspectos dessa subdivisão. Nesta tese, nos concentramos em três assuntos principais. Primeiro, generalizamos o algoritmo para investigar o crescimento em domínios que crescem ou diminuem com diferentes leis de potência no tempo, seguindo  $L(t) = L_0 + \omega t^\gamma$ , onde  $L$  é o tamanho do sistema,  $\omega$  e  $\gamma$  são parâmetros que determinam a taxa de variação do tamanho do substrato. Mostramos que sistemas com tamanhos iniciais grandes ( $L_0 \gg 1$ ), possuem um transiente com estatística da subclasse plana, independentemente do substrato estar expandindo ou contraindo, o que explica observações experimentais recentes com interfaces contraindo no tempo. Nos sistemas com substratos crescentes, mostramos que a competição entre o comprimento de correlação e o tamanho do sistema é essencial. Caso o sistema cresça mais devagar que o comprimento de correlação, a superfície se torna correlacionada, resultando em HD's Gaussianas e uma rugosidade que escala com o tamanho do sistema. No caso em que o comprimento de correlação e o tamanho do sistema crescem com mesmo expoente (quando  $\gamma = 1/z$ ), obtemos uma família de distribuições que interpola a Gaussiana com a distribuição de interfaces curvas a medida que  $\omega$  varia. Curiosamente, a HD passa pela distribuição do ensemble Gaussiano simplético (GSE) no meio dessa interpolação. Mostramos também que sistemas que crescem com expoentes maiores que o comprimento de correlação possuem a mesma HD que interfaces circulares ( $\gamma = 1$ ). Porém, as covariâncias variam com a velocidade, só possuindo a mesma forma

que as covariâncias do caso curvo quando  $\gamma = 1$ . Outro assunto que abordamos nesta tese foi o efeito da dinâmica do substrato em outras classes de universalidade além da KPZ. Verificamos que uma subdivisão análoga também é obtida nas classes VLDS, EW e MH, onde as distribuições de alturas e as covariâncias são universais dentro cada subclasse, mas diferentes de uma para a outra. Para finalizar, verificamos se outras grandezas universais da dinâmica de interfaces também variavam de acordo com a subclasse. Estudando a distribuição de rugosidade quadrática e a de extremos locais, verificamos que essas distribuições são as mesmas em ambas as subclasses.

## ABSTRACT

CARRASCO, Ismael Segundo da Silva, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, April, 2018. **Effects of the initial conditions on interface growth dynamics.** Adviser: Tiago José Oliveira. Co-advisers: Sílvio Costa Ferreira Júnior and Sidiney Geraldo Alves.

The interface dynamics is an important example of a critical system far from equilibrium. This field has attracted much attention of the scientific community due to the verification that the Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) universality class splits according to the geometry of a given interface. In this splitting, curved and flat interfaces have the same set of critical exponents, but different height distributions (HD's) and covariances (spatial en temporal). Recent simulations have shown that this subdivision is also observed in flat systems with lateral enlarging substrates, demonstrating that the curvature itself should not play an essential role in this splitting. The algorithm used in these simulations allow us to study different aspects of the subdivision. In this thesis, we concentrate mainly on three subjects. Firstly, we generalize the algorithm to investigate the growth in domains that grow or shrink with different power laws, following  $L(t) = L_0 + \omega t^\gamma$ , where  $L$  is the system size,  $\omega$  and  $\gamma$  are the parameters that determine the variation rate of the substrate size. We show that systems with large initial size ( $L_0 \gg 1$ ) have a transient with statistics of the flat subclass, independently of the enlargement or shrinkage of the substrate, explaining the recent experimental observation of interfaces shrinking in time. Consequently, since the decreasing systems need a large initial size to be studied in a reasonable time window, they necessarily show the transient in the flat subclass statistics. In the systems with enlarging substrates, we show that the competition between the correlation length and the system size is essential. If the system enlarges slower than the correlation length, the surface becomes correlated, resulting in Gaussian HD's and a roughness that scale with the system size. If the correlation length and the system size grows with the same exponent ( $\gamma = 1/z$ ), we obtain a family of distributions interpolating between the Gaussian and the distribution of curved interfaces as  $\omega$  increases. Curiously, the distribution passes through the Gaussian symplectic ensemble distribution in the middle of this interpolation. We also show that systems that enlarge with larger exponents than the correlation length have the same height distribution as the circular ( $\gamma = 1$ ) interfaces. However, the covariances depend on the speed of enlargement, only having the same form of the curved geometry when  $\gamma = 1$ . Another subject that we have studied in this thesis was the effect of the substrate dynamics in other universality classes, besides the

KPZ one. We have obtained an analogous splitting in the VLDS, EW e MH classes, where the height distribution and the covariances are universal in each subclass, but different from one another. To finish, we have analyzed if other universal quantities in the interface dynamics also are affected by the subdivision. Studying the squared local roughness distribution and the local extremes distribution, we have verified that these distributions are the same in both subclasses.

# Capítulo 1

## Introdução

O estudo da dinâmica de crescimento de interfaces é em grande parte motivado por sua aplicação direta na produção de filmes finos. O desenvolvimento de novos componentes eletrônicos, que são menores e/ou mais eficientes, é relacionado à compreensão e ajuste fino dos parâmetros envolvidos em sua fabricação. Exemplos desses componentes seriam: transistores, diodos e fotocélulas. Em sua maioria, esses dispositivos são produzidos através do crescimento de filmes finos de materiais semicondutores sobre substratos de Silício ou  $\text{SiO}_2$ . O desenvolvimento de componentes eletrônicos melhores está associado com a produção de computadores menores e mais potentes (como *smartphones*), detectores de radiação mais eficientes, etc.

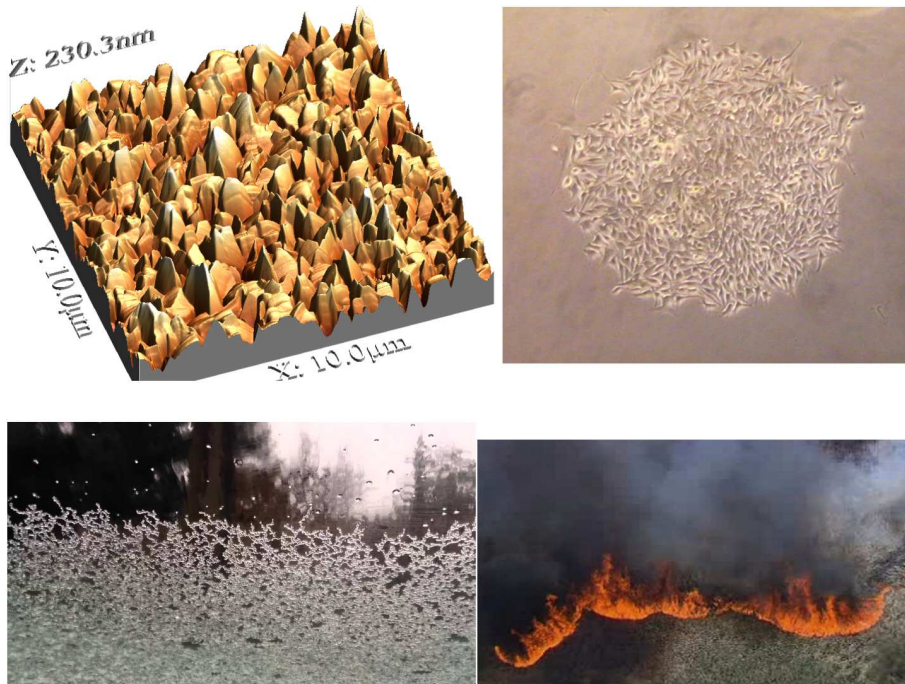
Apesar da forte aplicação em eletrônica, a dinâmica de interfaces vai bem além do domínio dos filmes finos. Essa área engloba fenômenos dos mais variados contextos. Para ilustrar essa diversidade, alguns exemplos que podemos citar são: frente de chamas [1], o fluxo de um líquido através de um meio poroso [2], depósitos de gelo [3] e a propagação de rachaduras em meios heterogêneos [4]. Existem também interfaces relacionadas a sistemas biológicos, como no crescimento de colônias de bactérias [5], tumores [6] etc. Assim, entender melhor a evolução e as propriedades gerais de interfaces pode impulsionar diferentes campos da ciência.

A grande variedade de interfaces encontradas na natureza é fruto das mais diversas interações entre seus constituintes fundamentais. No entanto, apesar dessas enormes diferenças, nota-se que diversos sistemas possuem propriedades estatísticas similares. Isso leva ao conceito de universalidade. De fato, é realmente deslumbrante observar que o crescimento de um filme fino (de resolução nanométrica), uma colônia de células (micrômetros), flocos de neve no para brisa de um carro (milímetros) e a queimada de uma floresta (metros), ilustrados na Fig. 1.1, podem ter várias características em comum<sup>1</sup>.

Algumas dessas propriedades em comum podem ser: o mesmo conjunto de expoentes de escala, distribuições de altura, covariâncias espaciais e temporais, distribuições de rugosidade quadrática local, distribuição de valor extremo local. Essas semelhanças mostram que, apesar das grandes diferenças entre as interações microscópicas que produzem diferentes interfaces, podemos reunir os sistemas com propriedades estatísticas similares em uma mesma classe de universalidade. Isso torna evidente que diversos detalhes são irrelevantes, importando apenas as simetrias/conservações envolvidas na dinâmica de formação dessas estruturas complexas. Dessa forma, aprender mais sobre uma classe de universalidade nos permite entender melhor todas as interfaces pertencentes a ela.

---

<sup>1</sup>Na verdade, nos dois últimos exemplos estamos nos referindo às versões mais controladas, obtidas em laboratório, [1] e [3] respectivamente. No caso das células e do filme fino, estamos fazendo uma alusão às referências [5,7,8].



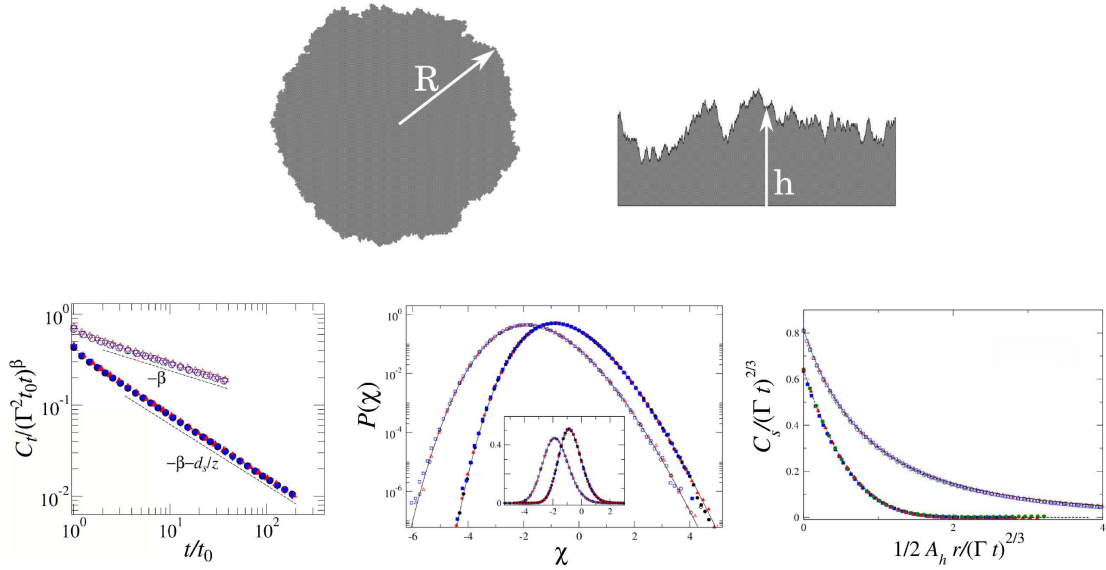
**Figura 1.1:** A primeira figura é uma imagem de AFM (Atomic Force Microscopy) de um crescimento de CdTe em Silício (100), feito no laboratório de Epitaxia do Departamento de Física (UFV). A segunda é uma colônia de células tumorais, cortesia do laboratório de Física Biológica (UFV). A terceira é o depósito formado pelo acumulo de flocos de neve no para brisa de um carro. A quarta é a queimada de uma floresta.

De um ponto de vista mais pragmático, a universalidade nos permite usar simulações para obter informações sobre uma vasta gama de fenômenos. Basicamente, definindo um modelo bem simples, que em sua dinâmica contenha uma forma rudimentar de algum mecanismo essencial na evolução de superfícies. Se esse modelo pertencer a alguma classe de universalidade, propriedades extraídas dele podem valer para todos os fenômenos contidos na dada classe. Além disso, a simplicidade do modelo acaba sendo uma grande vantagem, pois torna factíveis simulações mais extensas, com tamanhos de sistemas e tempos que seriam inacessíveis em modelos mais complexos ou em experimentos. Assim, os modelos simplificados que estudamos no decorrer desta tese, conhecidos coloquialmente como *toy models*, são muito úteis quando o “objeto” em estudo são as propriedades universais de maneira geral, e não os detalhes de um sistema real específico. Por isso, o conceito de universalidade acaba tornando as simulações uma ferramenta especialmente útil no contexto de dinâmica de interfaces, conectando resultados obtidos em simulações com uma vasta gama de fenômenos.

Avanços analíticos [9] e confirmações subsequentes [10–15] demonstraram que a classe de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) se subdivide de acordo com a geometria da interface, resultando em uma separação em algumas de suas propriedades estatísticas. Mais especificamente, ficou claro que, apesar de interfaces curvas e planas (ver Fig. 1.2) compartilharem o mesmo conjunto de expoentes de escala (pertencendo à mesma classe), as distribuições de altura e as covariâncias espaciais e temporais são diferentes.

Posteriormente, foi mostrado que, apesar dessa subdivisão ser frequentemente creditada à geometria, a mesma subdivisão pode ser obtida na simulação de superfícies planas que inflam lateralmente [16] (que chamamos de domínios crescentes). Nessa referência foram





**Figura 1.2:** Ilustração das similaridades e diferenças entre interfaces curvas e planas. Nos gráficos abaixo os pontos cheios são para a geometria plana e os vazios para a curva, onde mostramos da esquerda para a direita as curvas reescaladas para a covariâncias temporais, HD's e a covariâncias espaciais.

usados tamanhos de sistema que crescem linearmente no tempo, assim como é a relação entre o perímetro e o raio de um agregado circular. Essas simulações imitam apenas a evolução do tamanho lateral de uma interface em geometria curva, descartando completamente a curvatura. Apesar desses resultados parecerem impressionantes a primeira vista, na verdade, eles são de certa forma intuitivos. Isso porque as propriedades universais são obtidas no regime assintótico, com tamanhos e tempos muito longos. Nesse regime, os agregados curvos têm raios muito grandes, o que resulta em uma componente na curvatura local que tende a zero. Dessa forma, como os crescimentos envolvem interações locais, é natural que os constituintes fundamentais (ou partículas) não notem essa curvatura global, assim como nós não conseguimos notar a curvatura da terra apenas olhando ao nosso redor.

A abstração envolvida nessas simulações nos permite explorar profundamente questões muito interessantes. Por exemplo, duas realizações experimentais da classe KPZ em uma dimensão reportaram resultados conflitantes recentemente. De um lado, temos os experimentos realizados com a evaporação de gotas com suspensões coloidais, onde a medida que a gota evapora e retrai um depósito de partículas é formado em sua borda, produzindo uma interface circular que cresce “para dentro”, ou seja, com raio decrescente, (como pode ser visto a frente na Fig. 2.16(b), onde retomaremos essa discussão). Como parecia muito esperado na época, evidências foram observadas de que a “estatística” da superfície era dada pela subclasse KPZ curva [17]. De outro lado, temos o aclamado experimento em cristais líquidos turbulentos onde, partindo de um círculo grande como condição inicial, foi observado que a interface que cresce “para dentro” (ver 2.16(a)) tem a estatística da subclasse KPZ plana [18]. Tal resultado, que em princípio parece muito contra intuitivo, foi associado a um possível efeito do sinal da curvatura [18]. No entanto, considerando novamente as simulações descritas anteriormente, se a curvatura for mesmo irrelevante nessa subdivisão da classe KPZ, importando apenas a evolução do tamanho lateral da interface, nenhum dos dois casos se enquadrariam na subclasse KPZ “curva”, onde domínios crescem linearmente com o tempo. De fato, no

capítulo 4, mostramos com simulações em domínios que decrescem no tempo que a estatística da superfície é mesmo a da subclasse KPZ plana, porém ela é um efeito do tamanho inicial grande, e não do sinal da curvatura.

Nesses resultados mencionados anteriormente, fica evidente que a variação do tamanho do domínio tem papel crucial na estatística da superfície. Assim é natural se perguntar qual é o papel da competição entre o crescimento do comprimento de correlação e o crescimento do domínio na subdivisão ou estatística assintótica da classe KPZ, ou seja, o que acontece quando o domínio cresce com diferentes taxas não-lineares? É evidente que resultados especialmente interessantes devem acontecer quando essa taxa for próxima a da propagação das correlações. Na segunda metade do capítulo 4 abordamos essa questão em detalhes. Para isso, generalizamos o modelo proposto em [16] para produzir domínios com evolução de tamanho mais geral, que escalam com  $L \sim t^\gamma$ . Verificamos que quando a correlação cresce mais rápido que o sistema ele se torna correlacionado, caso contrário a estatística da superfície depende de  $\gamma$ , sendo a estatística da subclasse KPZ curva um caso particular obtido quando  $\gamma = 1$ . Além disso, se ambos crescem com taxas próximas, encontramos uma família de distribuições interpolando os dois regimes anteriores, dentre elas encontramos a distribuição do maior autovalor de matrizes do ensemble Gaussiano simplético (Gaussian Symplectic Ensemble – GSE).

Outro questionamento que podemos nos fazer é se essa subdivisão é algo exclusivo da classe KPZ. Esse é um assunto que, apesar de muito relevante, praticamente não tinha sido abordado, talvez por carência de experimentos ou modelos com interfaces curvas em outras classes de universalidade. Mesmo assim, a resposta para essa pergunta nos permite entender algo sobre a natureza das classes e dessa subdivisão. No capítulo 5, investigamos a diferença entre interfaces planas e curvas (na verdade, substratos de tamanho fixo e que crescem) nas classes VLDS, EW e MH. Daremos um foco maior à classe VLDS, pois ao contrário das demais, pouco se sabe sobre a estatística do regime de crescimento desta. Por isso, em busca de uma subdivisão na estatística, primeiro verificamos se há universalidade na distribuição de altura e nas covariâncias espaciais e temporais, que já é algo interessante por si só. Além disso, essa classe é um modelo teórico relevante para os crescimentos em MBE (Molecular Beam Epitaxy), que é uma técnica importante de crescimento de filmes finos. Nessas diferentes classes observamos um cenário parecido ao da classe KPZ, mostrando que a subdivisão é algo mais geral que se imaginava previamente.

Por último, como dito anteriormente, sabemos que a distribuição de altura e as covariâncias espacial e temporal são diferentes em cada subclasse, contudo, seria importante verificar se outras propriedades universais também são afetadas pela subdivisão. Duas quantidades estacionárias relevantes são a distribuição de rugosidade quadrática local (SLRD – *squared local roughness distribution*) e a distribuição de extremos locais (LEHD – *local extremal height distributions*), ambas frequentemente investigadas em experimentos [8,20–23], mas ainda sem uma análise nesse sentido. A possibilidade de trocar de subclasse apenas acrescentando uma variação temporal no tamanho do domínio abre as portas para um estudo bem detalhado. Podemos fixar o modelo e mudar apenas a subclasse, permitindo isolar os efeitos da subdivisão sobre a SLRD e a LEHD. Essa discussão é feita no capítulo 6, onde deixamos claro que essas distribuições não variam de uma subclasse para a outra. Mostramos também outros resultados que vão bem além do questionamento inicial.

No próximo capítulo apresentamos uma revisão de literatura, onde descrevemos os principais conceitos interessantes que cercam os problemas postos anteriormente. Uma revisão dos modelos e algoritmos utilizados nas simulações é apresentada no capítulo 3.

## Capítulo 2

# Revisão bibliográfica

Neste capítulo faremos uma revisão sobre os conceitos mais importantes relacionados aos fenômenos de crescimento de interfaces. O objetivo aqui é começar com os aspectos mais fundamentais sobre dinâmica de interfaces e adicionar gradativamente alguns ingredientes importantes para alcançarmos o nível necessário para se compreender os demais capítulos desta tese. É evidente que uma abordagem muito detalhada produziria um volume grande demais, que não é o objetivo desta tese. Mesmo assim, esperamos produzir uma revisão que possa ser um bom ponto de partida para um iniciante no assunto.

### 2.1 A dinâmica de interfaces e o equilíbrio termodinâmico

Nesta seção vamos descrever como a dinâmica de interfaces se relaciona com o equilíbrio termodinâmico, ou melhor, mostraremos porque normalmente este é um fenômeno longe do equilíbrio. Tomando o exemplo do crescimento de um filme fino, considerando um substrato dentro de uma câmara em alto vácuo, em contato com o vapor de um material a ser depositado. Para haver o crescimento de diversas camadas desse material sobre o substrato, do ponto de vista termodinâmico, deve existir uma diferença de potencial químico entre a fase do vapor e o filme em crescimento, o que explicaria o fluxo líquido de partículas de uma fase para outra no intuito de minimizar esse potencial químico. O fluxo constante de material para dentro da câmara irá manter essa diferença de potencial. Se essa fonte de material for desligada, o sistema começará a caminhar em direção ao equilíbrio. O gás na câmara começará a ficar mais rarefeito a medida que as partículas vão sendo depositadas no filme, até o momento em que o potencial químico da fase gasosa será tão baixo quanto o do filme e, a partir desse momento, não haverá mais um fluxo médio de partículas para a superfície, cessando o crescimento.

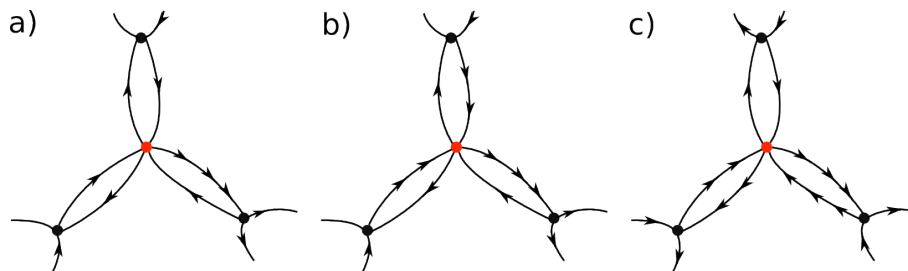
Para entender melhor a relação entre a dinâmica de interfaces e o equilíbrio, devemos primeiro definir precisamente o que caracteriza o equilíbrio. Do ponto de vista macroscópico, ou seja, termodinâmico, duas condições devem ser satisfeitas para haver o equilíbrio:

- As variáveis termodinâmicas devem ser independentes do tempo e homogêneas espacialmente.
- Não pode haver correntes no sistema.

Assim, fica claro que o crescimento descrito no parágrafo anterior é um fenômeno fora do equilíbrio, pois ele quebra ambas as condições.

Além do exemplo do crescimento do filme fino, existem diversos outros exemplos de crescimentos que não satisfazem as condições de equilíbrio dinâmico, como por exemplo, os

## 2.2 Eventos microscópicos em interfaces



**Figura 2.1:** Ilustração das taxas de transição entre um microestado e sua vizinhança quando não há balanço global (a), quando há balanço global mas não há balanço microdetalhado (b), quando há balanço microdetalhado (c). A quantidade de setas indica a intensidade do fluxo.

demais crescimentos ilustrados na Fig. 1.1. Do ponto de vista microscópico, agora usando Física Estatística, a transição entre microestados deve satisfazer reversibilidade microscópica para haver equilíbrio. Essa reversibilidade pode ser entendida através da Fig. 2.1, onde ilustramos o fluxo (pela quantidade de setas) entre um microestado (bolinha vermelha) e sua vizinhança (bolinhas pretas). No caso (a) não há balanço global, a distribuição dos estados varia no tempo, por isso não pode haver equilíbrio. No caso (b), apesar de haver balanço global, resultando em uma distribuição estacionária, existem correntes de probabilidade e, por consequência, produção de entropia [24,25]. No caso (c) temos balanço microdetalhado, o que garante que não há correntes de probabilidade e, portanto, temos reversibilidade e a distribuição é de equilíbrio. Dessa forma, fica evidente que se a dinâmica da interface envolver processos irreversíveis, o sistema estará longe do equilíbrio. Isso é evidente, por exemplo, na frente de chamas e no depósito de gelo da Fig. 1.1.

### 2.1.1 A energia de uma interface

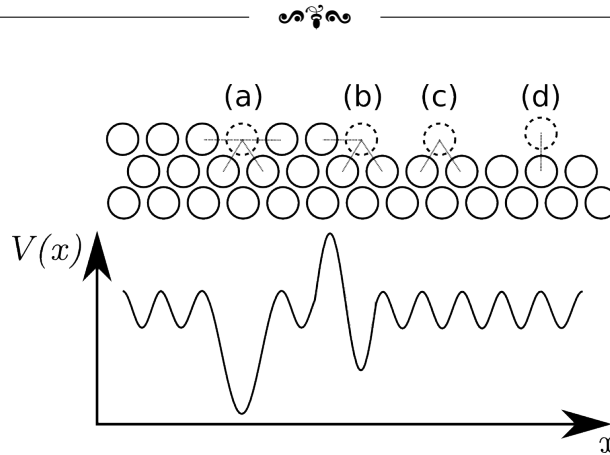
A interface que separa duas fases é uma estrutura energética, já que sempre há frustrações nas interações dos átomos ou moléculas que a constituem. Considerando, por exemplo, um cristal de silício, enquanto no interior desse bloco os átomos formam quatro ligações com os seus vizinhos (em uma estrutura cúbica de face centrada [27]), minimizando a sua energia, na superfície eles necessariamente formam menos ligações. Em fases líquidas, apesar de não haver ligações covalentes entre os seus constituintes, eles se atraem e na superfície essa atração é frustrada.

Podemos calcular a energia necessária para criar uma interface imaginando um cristal e pensando que para produzir uma interface precisamos cortar esse cristal, ou seja, romper ligações covalentes. Como o número de ligações rompidas dependerá diretamente da área ( $S$ ), fica evidente que o trabalho necessário será  $\delta W = \nu(2S)$ , onde  $\nu$  é a energia livre da interface por unidade de área, também conhecida como tensão superficial. O fator 2 aparece apenas porque o corte produz duas interfaces com área  $S$  [26].

## 2.2 Eventos microscópicos em interfaces

Voltando ao exemplo do crescimento de filme fino através de uma fase de vapor. As partículas do vapor adsorvem na superfície, formando ligações físicas, ou químicas, daqui em diante chamaremos essas partículas de adátomos. Uma vez ligado à interface, o adátomo estará sob efeito de um potencial que varia de acordo com a interação efetiva entre ele e a superfície. A Fig. 2.2 mostra de forma qualitativa como deve variar esse potencial em

### 2.3 Dedução de uma equação geral para a dinâmica de interfaces

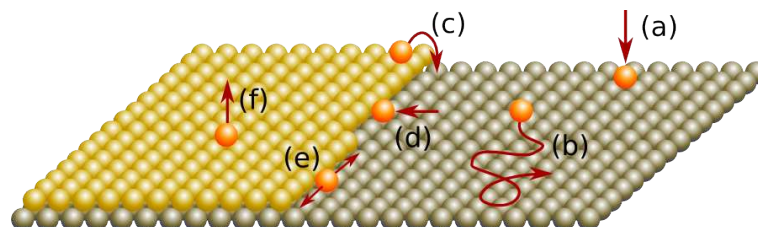


**Figura 2.2:** Idealização da forma qualitativa do potencial em uma rede unidimensional. Obs.: Aproveitamos para representar a barreira de Ehrlich–Schwoebel, que é o máximo mais proeminente que separa os dois terraços. Essa barreira pode ser pouco relevante dependendo do material em questão. Contudo, quando presente, ela pode causar mudanças significativas na dinâmica do crescimento e na morfologia final da interface [28].

uma rede unidimensional. Nesse exemplo simplificado, o adátomo em um platô fica em um máximo local desse potencial quando ligado a um átomo abaixo (d), ligado a dois átomos ele estaria em um mínimo desse potencial (c). Na posição (b) esse potencial possui um mínimo mais acentuado, onde ele faz três ligações, enquanto na posição (a) o mínimo é ainda mais profundo, devido às quatro ligações.

As flutuações térmicas do sistema podem fornecer energia para os adátomos da superfície superarem as barreiras de potencial e difundirem. Naturalmente, quanto maior a barreira  $\Delta E$ , menor é a chance de ocorrer a difusão. Esse processo termicamente ativado resulta em uma taxa de saltos entre sítios adjacentes (*hopping*) que segue a equação de Arrhenius  $h = \nu_0 e^{-\Delta E/k_B T}$ , onde  $\nu_0$  é a frequência de tentativas de *hopping* e  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Assim, os adátomos difundem aleatoriamente saltando entre sítios vizinhos (posições de mínimo de potencial onde os adátomos permanecem por mais tempo), com uma taxa que decai exponencialmente com a altura da barreira de energia a ser superada. Note que em altas temperaturas a energia de ativação se torna menos relevante, enquanto em baixas temperaturas até as pequenas barreiras dos platôs podem ser difíceis de ser superadas.

Na Fig. 2.3 mostramos alguns dos diversos eventos microscópicos termicamente ativados que podem ocorrer na superfície de um filme fino: (a) adsorção; (b) difusão; (c) difusão entre platôs; (d) agregação na borda de um degrau; (e) difusão na borda de um degrau; (f) dessorção.



**Figura 2.3:** Alguns eventos microscópicos que podem ocorrer durante o crescimento de um filme fino.

## 2.3 Dedução de uma equação geral para a dinâmica de interfaces

Nesta seção vamos deduzir uma equação para a descrever a evolução temporal da altura  $h$  em um ponto qualquer da interface. Faremos isso através de duas abordagens diferentes: uma utilizando termodinâmica e a outra processos estocásticos. Primeiro, vamos partir da energia livre da superfície e sua relação com o potencial químico. Essa abordagem é instrutiva por nos permitir discutir a relação entre energia livre, potencial químico, correntes superficiais e velocidade de crescimento, que segue de perto a Ref. [29]. Na segunda abordagem, partiremos do movimento browniano para um campo, considerando uma dinâmica dissipativa através de uma equação de Langevin. Esta segunda abordagem se baseia em [30,31,33]. Numa terceira subseção vamos discutir em detalhes as propriedades do ruído inerente à essa dinâmica.

### 2.3.1 Equação de movimento via energia livre

Apesar da granulação fundamental que existe quando olhamos para uma interface na escala de seus constituintes, através de um *coarse-graining*<sup>1</sup> vamos representá-la como uma função contínua e suave  $h(x,t)$ . Considerando que essa interface divide uma fase que tem tendência de crescer em detrimento de outra, elas devem ter, por exemplo, potenciais químicos  $\mu = -\mu_0$  e  $\mu = 0$ , respectivamente. Lembrando que a energia de uma interface é proporcional a sua área (em  $d = 1$ , ao seu comprimento) temos a energia livre

$$\mathcal{F}[h(x,t)] = \nu \int dx [1 + (h')^2]^{1/2} - \mu_0 \int dx h \quad , \quad (2.1)$$

onde  $h' \equiv \partial h / \partial x$ , a primeira integral é o comprimento do arco e a segunda é o potencial químico total da fase crescente.

A variação da energia livre produzida por uma variação pequena de  $h(x,t)$  (adição ou remoção de massa em alguma posição  $x$ ) é dada por  $\delta\mathcal{F}/\delta h$ . Como essa variação é induzida pelo potencial químico temos<sup>2</sup>:

$$\mu = \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta h} = -\nu \frac{h''}{[1 + (h')^2]^{3/2}} - \mu_0 \quad , \quad (2.2)$$

onde o termo que multiplica  $\nu$  é a curvatura. Note que o potencial químico é maior onde a curvatura é negativa (morros) e menor onde a curvatura é positiva (vales). Isso segue a discussão feita na seção anterior, onde foi ressaltado que os mínimos são posições mais estáveis, porque as barreiras de energia para partículas deixarem um mínimo são maiores que nos máximos.

A partir de agora temos que considerar se a difusão na superfície é importante ou não. Considerando o primeiro caso, os adátomos deverão difundir aleatoriamente na superfície até

<sup>1</sup>A tradução literal desse termo seria “granulação grosseira”. Isso corresponde basicamente a olhar para a superfície através de uma escala onde a sua granulação é imperceptível. Dessa forma, cada porção infinitesimal da superfície é na verdade uma média local de alguns constituintes da interface real.

<sup>2</sup>A derivada de um funcional  $\mathcal{F}[h] = \int dx f(h, h')$  é dada por:

$$\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta h} = \frac{\partial f}{\partial h} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial h'}$$

### 2.3 Dedução de uma equação geral para a dinâmica de interfaces

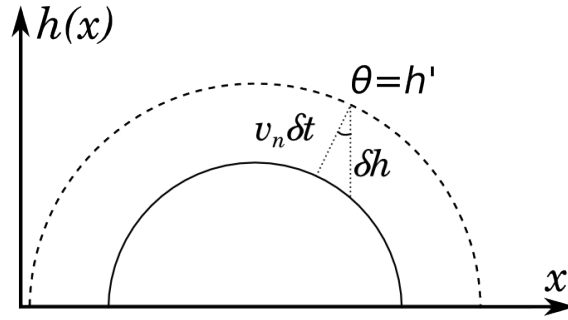


encontrarem posições “mais estáveis” nesta. Como vimos na seção passada, a difusão é um processo termicamente ativado onde o adátomo deverá superar barreiras de potencial para executar cada passo, com taxa que decresce exponencialmente com a altura da barreira de energia. Dessa forma, efetivamente podem se estabelecer correntes superficiais em direção aos seus vales, ou seja, na direção contrária ao gradiente do potencial químico. Então, a corrente deverá ser dada por

$$J = -\Gamma_a \frac{\partial \mu}{\partial s} = -\frac{\Gamma_a}{[1 + (h')^2]^{1/2}} \frac{\partial \mu}{\partial x} \quad , \quad (2.3)$$

onde  $\Gamma_a$  é uma constante que representa a mobilidade dos adátomos, e  $s$  é o comprimento do arco, dado pela primeira integral de 2.1. Essa corrente superficial será responsável por uma velocidade normal<sup>3</sup> de crescimento

$$v_n = -\frac{\partial J}{\partial s} = -\frac{1}{[1 + (h')^2]^{1/2}} \frac{\partial J}{\partial x} \quad . \quad (2.4)$$



**Figura 2.4:** Relação geométrica entre o crescimento na direção normal à superfície e na direção de  $h(x,t)$ .

A Fig. 2.4 mostra a relação geométrica entre  $v_n$  e  $\partial h/\partial t$ , assim temos:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v_n [1 + (h')^2]^{1/2} \quad . \quad (2.5)$$

Substituindo sucessivamente as equações para  $v_n$  (Eq. 2.4),  $J$  (Eq. 2.3) e  $\mu$  (Eq. 2.2) na equação anterior, obtemos:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\Gamma_a}{[1 + (h')^2]^{1/2}} \frac{\partial \mu}{\partial x} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\Gamma_a}{[1 + (h')^2]^{1/2}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \nu \frac{h''}{[1 + (h')^2]^{3/2}} \right) \right] \quad (2.6)$$

Já no caso em que a reorganização proporcionada por correntes superficiais não existe ou é irrelevante, como em um filme fino crescido a baixas temperaturas, vamos considerar que a relaxação da superfície se dá via minimização da energia livre. Portanto,

$$v_n = -\Gamma_i \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta h} = -\Gamma_i \mu \quad , \quad (2.7)$$

onde  $\Gamma_i$ , agora, é uma constante referente à mobilidade da interface como um todo.

Usando essa nova equação para  $v_n$  (Eq. 2.7), junto com as equações para  $\mu$  (Eq. 2.2)

<sup>3</sup>A corrente superficial é independente do referencial. Por isso o crescimento não acontece necessariamente na direção definida como vertical pela função  $h(x,t)$ .

### 2.3 Dedução de uma equação geral para a dinâmica de interfaces



e  $\partial h/\partial t$  (Eq. 2.5), nós obtemos:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \Gamma_i [1 + (h')^2]^{1/2} \left( \mu_0 + \nu \frac{h''}{[1 + (h')^2]^{3/2}} \right) . \quad (2.8)$$

Essa última equação possui duas soluções muito simples que são especialmente interessantes no contexto desta tese. Uma delas é a geometria plana  $h = \Gamma\mu_0 t$ . A outra é a geometria curva dada pelo semi-círculo  $h(x,t) = (R^2(t) - x^2)^{1/2}$  válido no intervalo  $x^2 \leq R^2$ , onde  $dR/dt = \Gamma_i(\mu_0 - \nu/R)$ . Essa última equação nos mostra que a diferença de potencial químico e a tensão superficial competem, produzindo um raio crítico  $R_c = \nu/\mu_0$  tal que a superfície decresce sob o efeito da tensão superficial se  $R < R_c$ , ou cresce sob o efeito da diferença de potencial químico se  $R > R_c$ .

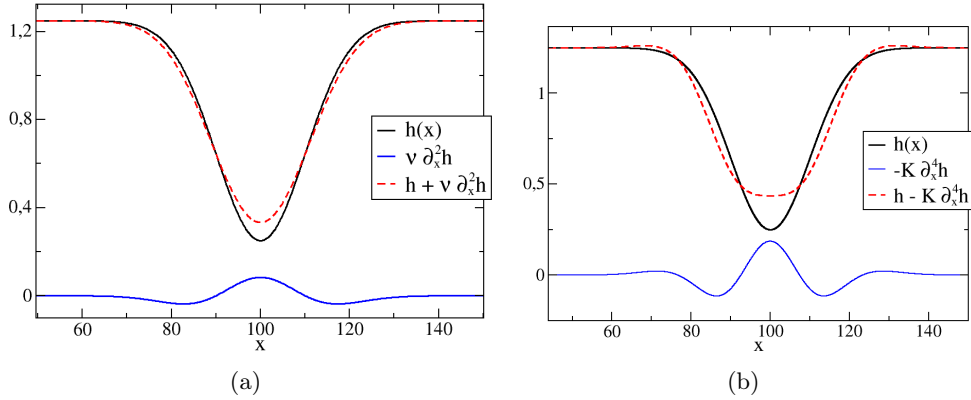
Até aqui obtivemos duas equações para a dinâmica de interfaces, porém é difícil aplicá-las diretamente por serem muito complicadas. Elas se tornam muito mais simples se considerarmos um regime de baixas inclinações, onde  $[1 + (h')^2] \approx 1$ . Nesse regime 2.6 se torna:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nu_4 \nabla^4 h , \quad (2.9)$$

onde trocamos o produto  $\Gamma_a \nu$  por  $\nu_4$  e generalizamos para  $d > 1$ . Já 2.8 é reduzida a

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu_2 \nabla^2 h + F , \quad (2.10)$$

onde dessa vez trocamos  $\Gamma_i \nu$  por  $\nu_2$ , e trocamos também o termo constante  $\Gamma_i \mu_0$  por um fluxo  $F$ . Note que no regime de baixas inclinações,  $\nabla^2 h$  é a curvatura local, logo vales crescem e morros decrescem. Sendo assim, a equação anterior representa a dinâmica de uma interface sobre o efeito de uma tensão superficial. A Fig. 2.5(a) ilustra o efeito do termo  $\nabla^2 h$  sobre um suposto vale em uma interface após um pequeno intervalo de tempo  $\delta t$ . Isso era esperado tendo em vista a energia livre definida na Eq. 2.1.



**Figura 2.5:** Ilustração do efeito de  $\nabla^2 h$  (a) e  $\nabla^4 h$  (b) sobre um suposto vale em uma superfície unidimensional. Usamos valores de  $\nu$  e  $K$  que produzem efeitos visíveis na escala utilizada.

Voltando à equação 2.6, é fácil notar que ela é basicamente a equação de continuidade na superfície. A equação 2.2 em baixas inclinações nos mostra que  $\mu \sim -\nabla^2 h$ , enquanto a Eq.



## 2.3 Dedução de uma equação geral para a dinâmica de interfaces



2.3 mostra que  $\vec{J} \sim -\vec{\nabla}\mu$ . Portanto, fica evidente que 2.9 é mesmo a equação de continuidade<sup>4</sup> das correntes superficiais. A Fig. 2.5(b) ilustra o efeito do termo  $\nabla^4 h$  sobre um suposto vale de uma superfície. O único ingrediente que ainda falta nas equações 2.9 e 2.10 é o ruído. De fato, a dedução que fizemos considerou um crescimento determinístico, negligenciando a estocasticidade inerente à evolução de interfaces. Por exemplo, na deposição, as partículas devem chegar à superfície em posições e com velocidades aleatórias. A difusão é também um processo naturalmente estocástico. Assim, precisamos adicionar um termo de ruído  $\eta(x,t)$  em ambas equações (2.9 e 2.10) para contabilizar esses efeitos.

### 2.3.2 Dedução via dinâmica dissipativa

Para entendermos do que se trata uma dinâmica dissipativa, vamos discutir brevemente o movimento browniano. Imaginando uma partícula de poeira na água, sabemos que o impacto constante com as moléculas do líquido faz o movimento dessa partícula ser irregular. Considerando uma dinâmica newtoniana, seu movimento seria dado por:

$$m\ddot{\vec{x}} = -a\dot{\vec{x}} - \vec{\nabla}V + \vec{\eta}(t) \quad . \quad (2.11)$$

O primeiro termo do lado direito dessa equação é a força de arrasto no fluido, o segundo é uma força conservativa expressa como o gradiente de um potencial, e o terceiro representa o desbalanço nas colisões aleatórias com as moléculas de água, produzindo uma força resultante aleatória.

A observação de um movimento browniano revela um passeio bem característico, onde a partícula executa pequenos saltos em direções aleatórias, mudando rapidamente a direção da sua velocidade. Isso evidencia que o termo de inércia deve ser pouco relevante, e a velocidade adquirida é rapidamente dissipada pelo arrasto no fluido, ou seja, o movimento é superamortecido. Sendo assim, o movimento é bem descrito pela equação de Langevin

$$\dot{\vec{x}} = -\frac{1}{a}\vec{\nabla}V + \eta(\vec{x},t) \quad . \quad (2.12)$$

Para descrever a dinâmica de uma interface basta generalizar essa equação para vários graus de liberdade, produzindo um campo contínuo  $h(x,t)$ . Então, definimos uma Hamiltoniana que contenha os principais efeitos superficiais

$$\mathcal{H}[h] = \nu \int d^d x \sqrt{1 + (\nabla h)^2} + \nu_4 \int d^d x \frac{1}{2}(\nabla^2 h)^2 \quad , \quad (2.13)$$

onde a segunda integral representa a contribuição da curvatura que, como vimos na subseção anterior, tem um papel relevante quando há difusão. A equação de movimento da superfície seria então:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h} + \mathcal{V} + \sqrt{D}\eta(x,t) \quad , \quad (2.14)$$

onde  $\sqrt{D}$  é uma constante relacionada à amplitude do ruído, e  $\mathcal{V}$  coleta as contribuições que não podem ser obtidas de uma Hamiltoniana, isto é, termos que não produzem uma dinâmica

<sup>4</sup>A equação de continuidade é dada por:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}$$

### 2.3 Dedução de uma equação geral para a dinâmica de interfaces

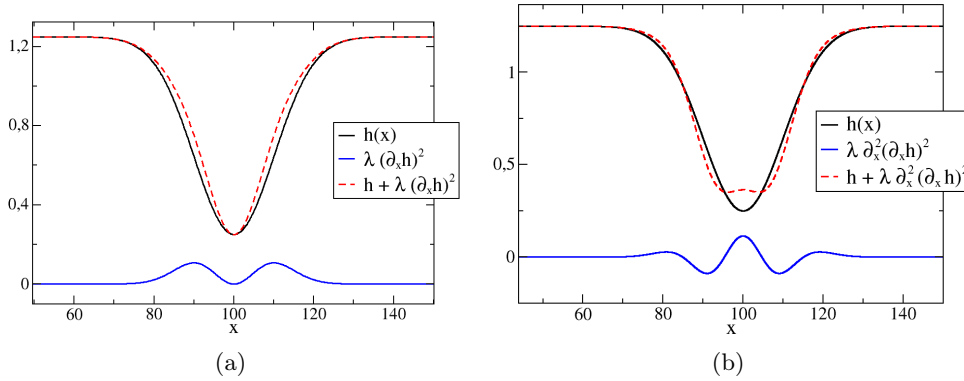


de equilíbrio sobre hipótese alguma. Aplicando essa derivada funcional<sup>5</sup> em  $\mathcal{H}$  obtemos:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h - \frac{\nu}{2} \nabla \cdot (\nabla h)^3 + \nu_4 \nabla^4 h + \mathcal{V} + \sqrt{D} \eta \quad (2.15)$$

onde expandimos a tensão superficial  $\int d^d x \sqrt{1 + (\nabla h)^2} = \int d^d x (1 + (\nabla h)^2/2 - (\nabla h)^4/8 \dots)$  e consideramos apenas os dois primeiros termos. Perceba também que a equação anterior já engloba uma combinação das equações 2.9 e 2.10.

Agora vamos discutir os principais termos que devem estar contidos em  $\mathcal{V}$ . Tomando o exemplo da frente de chamas, é de certa forma evidente que o crescimento não é necessariamente na direção do eixo que define  $h(x,t)$ , e sim localmente normal à interface. Como já discutido na subseção passada, nesse caso a variação em  $h(x,t)$  deve estar relacionada à velocidade normal via  $\partial h / \partial t = v_n \sqrt{1 + (\nabla h)^2}$ , como na Fig. 2.4. Expandindo e mantendo apenas o termo de ordem mais baixa temos um termo  $(\nabla h)^2$ . O próximo termo que iremos adicionar é o  $\nabla^2 (\nabla h)^2$ . Esse termo é a próxima correção não-linear mais relevante nesse problema. Apesar dele não possuir uma interpretação tão clara quanto o termo anterior, existe uma especulação de que ele seja relevante quando o processo de difusão trata de forma equivalente a subida ou descida de degraus na superfície [31] (na referência [32] temos uma verificação interessante disso). Vamos discutir mais sobre esse termo na seção sobre a classe VLDS. O efeito desses dois termos sobre um vale de uma superfície está ilustrado na Fig. 2.6.



**Figura 2.6:** Ilustração do efeito de  $(\nabla h)^2$  (a) e  $\nabla^2 (\nabla h)^2$  (b) sobre um suposto vale de uma superfície unidimensional.

A equação final que obtemos é, portanto,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\lambda_1}{2} (\nabla h)^2 + \nu_2 \nabla^2 h - \frac{\nu_2}{2} \nabla \cdot (\nabla h)^3 + \lambda_4 \nabla^2 (\nabla h)^2 + \nu_4 \nabla^4 h + \sqrt{D} \eta(x,t), \quad (2.16)$$

que exprime os termos mais relevantes na dinâmica de interfaces. Note que ela possui mais termos que a combinação das equações obtidas na subseção anterior. Na verdade, a abordagem da subseção anterior também pode produzir essa equação. O correto teria sido considerar um potencial químico e uma corrente mais gerais com correções não-lineares, por se tratar de um sistema fora do equilíbrio. Todavia, o nosso objetivo foi conectar conceitualmente a

<sup>5</sup>Para um funcional que depende de derivadas de segunda ordem  $\mathcal{H}[h] = \int d^d x f(h, \nabla h, \nabla^2 h)$  a derivada funcional é dada por:

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta h} = \frac{\partial f}{\partial h} + \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla h} + \nabla^2 \frac{\partial f}{\partial \nabla^2 h}$$

## 2.3 Dedução de uma equação geral para a dinâmica de interfaces



energia livre com o potencial químico e as correntes superficiais, conseqüentemente, produzindo resultados que são boas descrições apenas para sistemas próximos do equilíbrio. Longe do equilíbrio é mais natural se utilizar equações estocásticas como feito nesta subseção.

Mais adiante, quando discutirmos classes de universalidade, a menos que o interesse seja o *crossover*<sup>6</sup> entre as classes, veremos que normalmente é desnecessário considerar todos esses termos ao mesmo tempo, porque a dinâmica é dominada pelos termos mais relevantes no regime assintótico. Por isso, vamos separar da equação 2.16 os termos e discutir as classes de universalidade associadas às suas combinações.

### 2.3.3 O ruído e suas propriedades

Como veremos a frente, a presença da aleatoriedade na dinâmica de interfaces é essencial na formação das morfologias complexas observadas na natureza, e a competição entre o ruído e os termos de relaxação é o que produz as diferentes classes de universalidade. Entretanto, antes dessa discussão, é interessante entender a origem do ruído em diferentes sistemas. É natural imaginar que o ruído referente à queima de uma floresta não deve ser igual ao vinculado à estocasticidade do processo de difusão sobre um filme fino. De fato, na queima de uma floresta ou de uma folha de papel, esse ruído deve estar relacionado, principalmente, à flutuações na densidade do combustível, que são flutuações do meio onde a interface se propaga. O mesmo deve ocorrer em um fluido se propagando em um meio poroso. Esse ruído associado ao meio é conhecido como ruído congelado (*quenched noise*). Dependendo de suas propriedades, a interface pode ficar retida em regiões de difícil propagação, impedindo o seu deslocamento, o que chamamos de transição *pinning-depinning*, que em tradução livre seria algo como “ancorada-livre”.

Outra origem para o ruído é a aleatoriedade na posição e velocidade das partículas que fluem em direção a interface, que vamos chamar de ruído de deposição, e a estocasticidade na difusão das partículas sobre a superfície. Note que existe uma diferença muito importante entre esses dois processos, pois, enquanto a difusão conserva o número de partículas na superfície, a deposição acrescenta partículas. Então, um ruído não-conservativo pode ser separado em um fluxo médio  $F$  mais uma variável aleatória  $\eta_n(x,t)$ , que deve ser um ruído branco com média nula e descorrelacionado no tempo e no espaço, ou seja:

$$\langle \eta_n(x,t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle \eta_n(x,t) \eta_n(x',t') \rangle = 2\delta^d(x-x')\delta(t-t') \quad (2.17)$$

onde  $d$  é a dimensão da interface. Para um ruído conservativo, que deve estar vinculado à uma corrente estocástica via  $\eta_c(x,t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_c(x,t)$ , teremos:

$$\langle \eta_c(x,t) \rangle = 0, \quad \text{e} \quad \langle \eta_c(x,t) \eta_c(x',t') \rangle = 2\nabla^2 \delta^{ds}(x-x')\delta(t-t'). \quad (2.18)$$

É importante ressaltar a diferença entre o que chamamos de difusão nos termos de relaxação propostos nas subseções passadas e esse ruído conservativo. Note que os termos de relaxação representam efeitos determinísticos, sendo assim, eles contabilizam apenas uma espécie de corrente líquida em direção as posições mais estáveis da superfície. Já o ruído conservativo representa uma corrente totalmente aleatória devido a flutuações térmicas, sem uma direção preferencial.

Se considerarmos que o termo de ruído na Eq. 2.16 se desdobra em  $\sqrt{D_n}\eta = \sqrt{D_n}\eta_n + \sqrt{D_c}\eta_c$ , a competição entre esses dois termos produz um comprimento caracte-

<sup>6</sup>A tradução literal desse termo seria algo como “cruzamento”, esse termo é corriqueiro em Física Estatística. Ele é usado para denominar, por exemplo, o cruzamento (sem transição de fases) entre fases distintas.

## 2.4 Enrugamento cinético



rístico  $l = (D_c/D_n)^{1/2}$ . Entre as consequência dessa competição existem dois casos que são fáceis de se avaliar. No limite onde o tempo entre cada deposição é suficiente para que os adátomos se desloquem um comprimento muito maior que o tamanho do sistema ( $L$ ), ou seja  $l \gg L$ , o processo de difusão permite que as partículas acessem cada lacuna na superfície antes de se fixarem. Dessa forma, o crescimento produz interfaces mais lisas, em geral. Para uma discussão mais detalhada, ver [33]. Caso contrário, quando  $l \ll L$ , esse comprimento característico pequeno introduzido pela difusão se torna irrelevante, não alterando a morfologia final obtida.

Como nesta tese estamos interessados nas classes de universalidade vinculadas à fenômenos de crescimento com deposição rápida, daqui em diante vamos considerar apenas o ruído não conservativo. Além disso, como o fluxo  $F$  adiciona apenas uma constante na equação de crescimento, podemos considerar um referencial que se desloca junto com a interface com velocidade  $F$ , tal que  $h' \rightarrow h + Ft$ . Dessa forma, ficamos com a equação 2.16 onde o  $\eta(x,t)$  tem as propriedades dadas por 2.17.

## 2.4 Enrugamento cinético

Os fenômenos de crescimento frequentemente produzem morfologias muito interessantes e complexas. Uma primeira grandeza que podemos definir para extrair algo quantitativo dessas morfologias é a rugosidade, que em  $d$  dimensões é dada por:

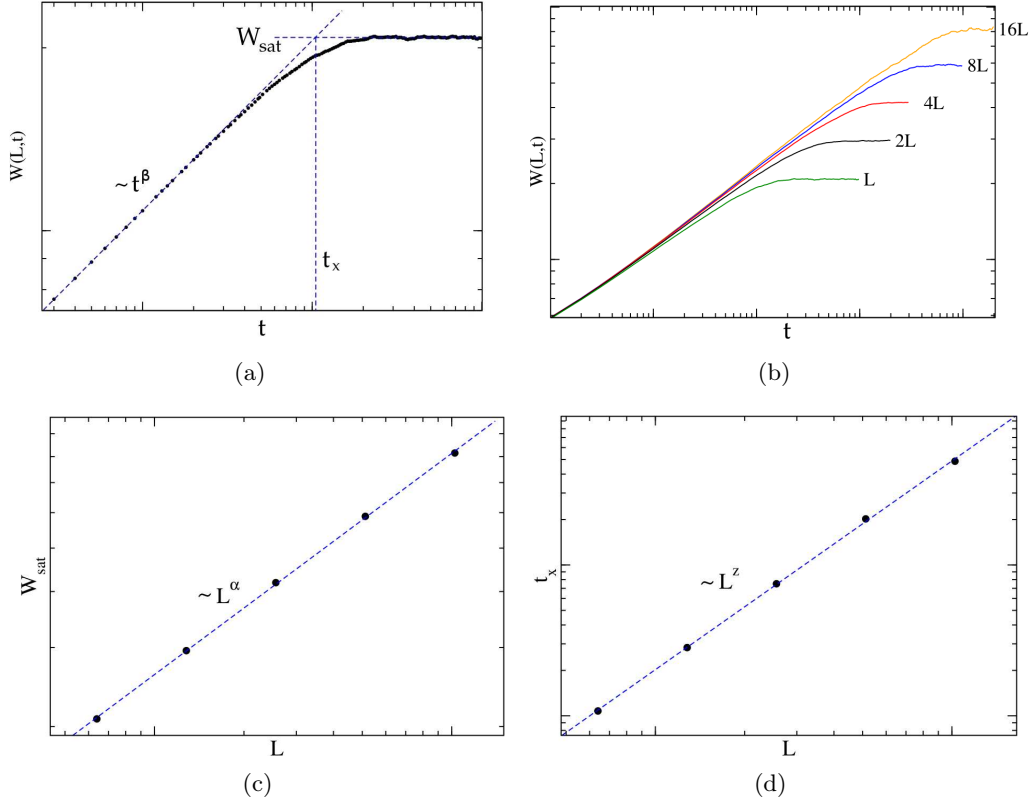
$$W(t) = \sqrt{\frac{1}{L^d} \int_0^L \dots \int_0^L dx^d [h(\vec{x},t) - \bar{h}(t)]^2}$$

onde  $\bar{h}(t)$  é a média das alturas e  $L$  é o tamanho lateral da interface  $d$ -dimensional. Como essa grandeza é basicamente o desvio padrão da distribuição de altura, essa quantidade mede a largura característica da interface.

A proposta de descrição do crescimento via uma equação tipo Langevin nos permite criar uma intuição sobre os principais ingredientes responsáveis pelas morfologias produzidas. Na equação 2.16, temos a variação temporal da superfície associada a formas determinísticas de relaxação mais flutuações introduzidas pelo ruído. Enquanto os termos de relaxação tentam produzir vínculos locais, por serem derivadas, o ruído perturba constantemente essa produção local de correlação. Para dar mais concretude a essa abstração, imagine uma deposição sobre um substrato perfeitamente plano. A medida que partículas são depositadas em posições aleatórias dessa superfície, como efeito do ruído, a condição inicial se perde e a rugosidade deve começar a crescer. Porém, usualmente, a interface não se torna algo totalmente aleatório, pois as partículas que chegam à superfície se agregam sob o efeito de algum vínculo local. A Fig. 2.7(a) ilustra como, em geral, a rugosidade de uma interface evolui no tempo. Inicialmente, ela cresce com uma lei de potência e, após um tempo de *crossover*  $t_x$ , essa rugosidade para de crescer, alcançando um valor de saturação. Essa saturação ocorre porque as correlações propagadas pela relaxação da superfície produzem um comprimento de correlação  $\xi$  que cresce paralelo ao substrato a medida que novas partículas são adicionadas à superfície. Quando  $\xi \sim L$ , o sistema se torna completamente correlacionado. Assim, a dinâmica de cada localidade da superfície adquire uma dependência estatística com o resto da superfície, o que impede o aumento da variância das alturas indefinidamente num sistema finito.

Esse enrugamento da superfície se dá, em geral, seguindo leis de potência. Enquanto  $\xi \ll L$ , a rugosidade cresce no tempo com  $t^\beta$ , o que chamamos de *regime de crescimento*. Quando  $\xi \sim L$  a rugosidade atinge um valor de saturação  $W_{sat}$ , que, como podemos ver na

## 2.4 Enrugamento cinético



**Figura 2.7:** Ilustração do comportamento típico para a rugosidade de uma interface em seu enrugamento cinético. (a) Evolução da rugosidade no tempo partindo de um substrato inicialmente liso (ou seja, com  $h(\vec{x}, t) = 0$ ). (b) e (c) Dependência da rugosidade de saturação com o tamanho do sistema. (d) Relação entre o tempo de *crossover* e o tamanho do sistema.

Fig. 2.7(b), depende do tamanho do sistema. Essa dependência também se dá via uma lei de potência, como pode ser visto na Fig. 2.7(c), sendo  $W_{sat} \sim L^\alpha$ . Como discutido no paragrafo anterior, por trás dessa transição para o *regime de saturação* está a evolução do comprimento de correlação<sup>7</sup>. Esse comprimento deve escalar com  $\xi \sim t^{1/z}$ , de onde definimos o expoente dinâmico  $z$ . Portanto, como a transição para o regime de saturação ocorre em um tempo  $t_x$ , o tempo de *crossover* também vai depender do tamanho do sistema através de uma lei de potência, sendo ela  $t_x \sim L^z$ , como podemos ver em Fig. 2.7(d). Note que esses expoentes não podem ser totalmente independentes, visto que em torno da saturação temos  $W \sim t_x^\beta$  pela esquerda e  $W_{sat} \sim L^\alpha$  pela direita, lembrando que  $t_x \sim L^z$  temos:

$$\alpha = z\beta \quad (2.19)$$

Essas leis de potência são consequências de uma característica muito interessante das morfologias comumente encontradas em fenômenos de crescimento: a auto-afinidade. Essa propriedade está vinculada à invariância da morfologia sob uma transformação de escala

<sup>7</sup>Tomando um sinal ruidoso hipotético  $X(s)$ , a covariância  $\langle X(s)X(s+\Delta s) \rangle$  frequentemente decai exponencialmente com  $e^{-\Delta s/\xi}$ , onde fica evidente que a lentidão desse decaimento está relacionado ao comprimento de correlação  $\xi$ . Nesse contexto, se a covariância decai com uma lei de potência temos uma correlação de longo alcance como consequência de  $\xi \rightarrow \infty$ .

## 2.4 Enrugamento cinético



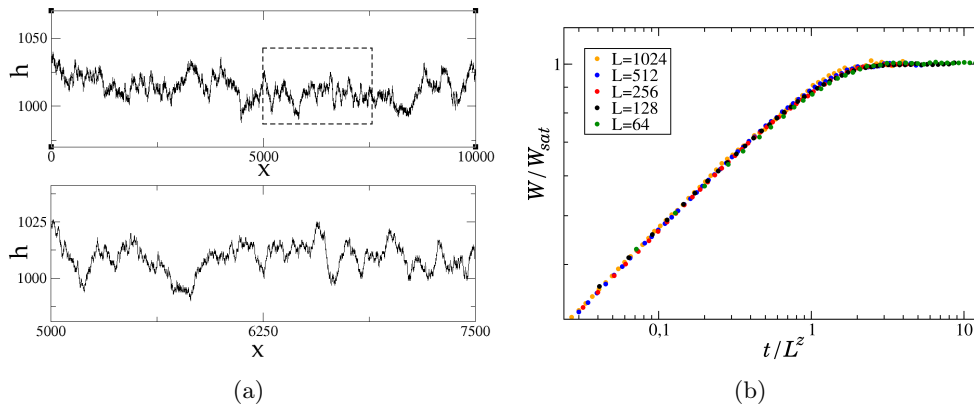
anisotrópica <sup>8</sup>. Essa transformação é implementada através de:

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = b\vec{x}, \quad h \rightarrow h' = b^\alpha h \quad \text{e} \quad t \rightarrow t' = b^z t, \quad (2.20)$$

onde  $b$  é um fator de escala positivo arbitrário. Note que essa transformação de escala envolve os expoentes presentes na escala da rugosidade. A auto-afinidade pode ser claramente ilustrada através da aplicação de uma reescala em um perfil de alturas. Na Fig. 2.8(a) mostramos que uma reescala apropriada de uma porção do perfil produz uma nova interface com flutuações que são estatisticamente similares. Sendo assim, uma mudança de escala propícia deve ser capaz de colapsar as curvas de rugosidade para diferentes tamanhos de sistema. Com base nisso, Family-Vicsek [35] propuseram que a rugosidade deve seguir a relação de escala

$$W \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (2.21)$$

onde  $f(x)$  tem a forma característica exemplificada na Fig. 2.8(b):  $f(x) \sim x^\beta$ , se  $x \ll 1$ , e  $f(x) \sim \text{constante}$ , se  $x \gg 1$ .



**Figura 2.8:** (a) Exemplo de uma interface auto-afim com  $\alpha = 0,5$ , onde foi feito um zoom de quatro vezes no eixo  $x$  e de duas vezes no eixo  $y$ . (b) Colapso das curvas de rugosidade através da relação de escala de Family-Vicsek.

A evolução da rugosidade determinada por um conjunto de expoentes nos leva à um conceito muito fundamental da Física e que se faz presente também na dinâmica de interfaces, o de universalidade. Esse conceito emerge quando se nota que a evolução da morfologia de sistemas totalmente distintos frequentemente envolve o mesmo conjunto de expoentes. Sendo mais específico, tomando o exemplo da frente de chamas e do depósito de gelo, por mais que esses sistemas tenham escalas distintas e que sua evolução seja resultado de interações totalmente diferentes entre seus constituintes microscópicos, a sua rugosidade evolui com o mesmo conjunto de expoentes [36,37]. Dessa forma, podemos colecionar diversos sistemas em uma mesma *classe de universalidade*, e com poucas dessas classes conseguimos descrever um conjunto muito amplo de fenômenos de crescimento. Como veremos a seguir na seção 2.5, essas classes de universalidade são definidas pelas simetrias e pelos principais elementos envolvidos na dinâmica, como as regras de difusão, por exemplo.

<sup>8</sup>De um ponto de vista mais fundamental, as morfologias complexas frequentemente encontradas nos fenômenos de crescimento são objetos fractais. Isso significa que essas morfologias não são bem descritas pela geometria euclidiana, necessitando da abordagem mais geral desenvolvida por Benoit Mandelbrot [34].

É interessante comentar que o enrugamento cinético possui algumas propriedades observadas em transições de fase de segunda ordem. Note que ele apresenta correlações de longo alcance e invariância de escala, que se traduz em leis de potência com expoentes de escala não triviais, da mesma forma que um sistema em equilíbrio em um ponto crítico. Por isso o enrugamento cinético é eventualmente referido como um fenômeno *crítico*. Porém, apesar dessas semelhanças, nele não é evidente a existência de um parâmetro de ordem ou picos em funções resposta, como é característico de uma transição de fase contínua. Por isso talvez seja mais prudente utilizar o termo invariância de escala genérica (GSI – *generic scale invariance*), referindo-se a invariância de escala, correlações de longo alcance no tempo e no espaço. De qualquer forma, outra diferença interessante de se ressaltar é que enquanto um sistema de equilíbrio precisa de um ajuste fino para se observar a GSI, já que ela normalmente acontece em um único ponto do diagrama de fases, o enrugamento cinético não necessita desse ajuste fino. Como consequência disso, enquanto é muito difícil se deparar naturalmente com GSI no equilíbrio, diversos dos exemplos de enrugamento cinético já comentados até aqui acontecem sem precisar levar o sistema a um ponto muito específico do diagrama de fase.

### 2.4.1 O expoente da rugosidade $\alpha$ e a morfologia da interface

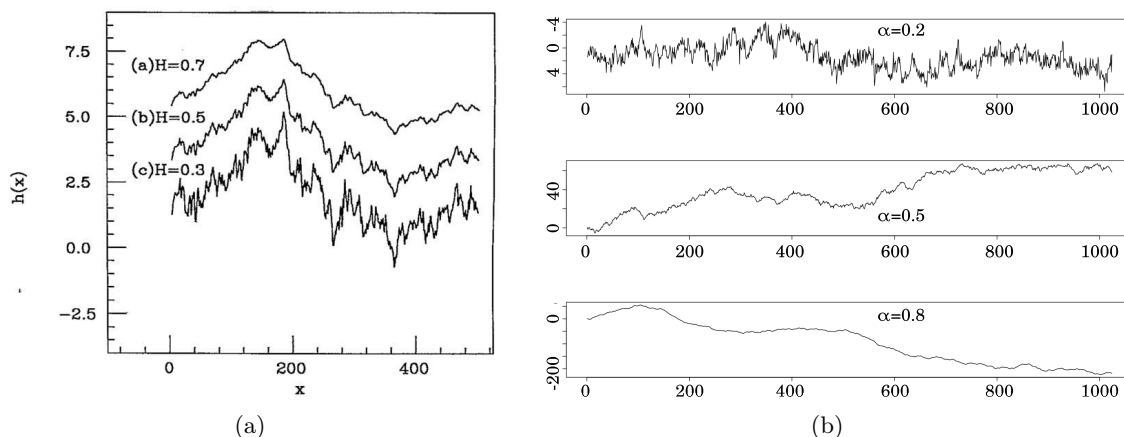
Como vimos anteriormente, associado ao enrugamento cinético temos um conjunto de três expoentes que definem as classes de universalidade. Apesar dos três expoentes serem igualmente importantes na determinação da classe de universalidade de uma interface, o expoente  $\alpha$  é, de certa forma, diferente dos demais. Os expoentes  $\beta$  e  $z$  são referentes à dinâmica do sistema, visto que ambos são expoentes de escalas temporais, já o  $\alpha$  está relacionado à morfologia instantânea da superfície. Dessa forma, enquanto a determinação dos expoentes  $\beta$  e  $z$  a princípio dependem de alguma série temporal, o  $\alpha$  pode ser extraído de um estado instantâneo da superfície. Para isso, uma opção é, ao invés de calcular a rugosidade (global do sistema todo), calcular a média da rugosidade em janelas com diferentes tamanhos. Enquanto essas janelas forem menores que o comprimento de correlação, devemos ter o análogo da rugosidade global de um sistema saturado, logo esperamos que essa rugosidade em janelas escale com  $W(l) \sim l^\alpha$ , onde  $l$  é o tamanho da janela, supondo não haver anomalia na rugosidade<sup>9</sup>. É interessante discutir em detalhes essa escala, pois ela pode ser mal interpretada [43,44]. De acordo com essa lei de potência, quanto maior o  $\alpha$  mais rapidamente a rugosidade varia com o tamanho do sistema, e isso significa que em escalas grandes o sistema é mais rugoso e que em pequenas escalas ele é mais suave. Para ilustrar o efeito dessa escala vamos considerar a Fig. 2.9(a), extraída de [43]. Nessa figura podemos ver que, fixada a rugosidade global, quanto maior o  $\alpha$  mais suave é a interface em pequenas escalas, onde  $\alpha$  é denotado como expoente de Hurst nessa imagem.

Essa discussão sobre a suavidade em curtas escalas fica mais precisa quando consideramos a fractalidade da superfície. Considerando uma interface unidimensional, a análise da morfologia desse sistema é análoga ao estudo da série temporal de um ruído, onde a janela de tempo passa a ser o tamanho do sistema<sup>10</sup>. A dimensão fractal desse tipo de sinal ruidoso é  $d_f = 2 - \alpha$ . Assim, fica evidente que quanto menor o  $\alpha$  mais o sinal “preenche” o espaço

<sup>9</sup>A rugosidade é dita anômala quando as flutuações locais tem propriedades diferentes das globais. Uma de suas consequências é a rugosidade global escalar com  $W(L) \sim L^\alpha$  enquanto a local  $W(l) \sim l^{\alpha_{loc}}$ , com  $\alpha \neq \alpha_{loc}$ . Isso é apenas parte da discussão, uma abordagem mais completa pode ser encontrada na Ref. [42].

<sup>10</sup>Esse tipo de análise é razoavelmente mais antiga do que o estudo do enrugamento cinético, datando de antes dos primeiros trabalhos de Benoit Mandelbrot, que foi o matemático que formalizou o estudo de objetos fractais. Nessa época o expoente que fazia o papel do  $\alpha$  era conhecido como expoente de Hurst, normalmente denotado por  $H$ .

## 2.5 Classes de universalidade



**Figura 2.9:** (a) Figura extraída de [43], que mostra perfis auto-afins produzidos com diferentes  $H = \alpha$ . (b) Figura extraída de [45] e levemente editada, mostrando o movimento Browniano fracionário produzido com diferentes  $\alpha$ 's.

bidimensional e mais perto de dois é a sua dimensão. Por outro lado, quando  $\alpha \rightarrow 1$  mais próximo de uma curva regular unidimensional o sinal se torna.

Uma intuição interessante sobre o mecanismo por trás dessa dimensão fractal pode ser obtida interpretando o movimento browniano fracionário<sup>11</sup>. Nesse caso os passos do movimento não são decorrelacionados e a covariância dos seus incrementos é

$$\langle \Delta B_\alpha(t_0) \Delta B_\alpha(t_0 + k) \rangle = \frac{1}{2} (|k-1|^{2\alpha} - 2|k|^{2\alpha} + |k+1|^{2\alpha}) \quad ,$$

onde  $\Delta B_\alpha$  é o incremento (passo) do movimento browniano fracionário [45,46]. Dessa covariância podemos notar que  $\alpha = 1/2$  retorna o movimento Browniano ordinário com passos decorrelacionados, por outro lado, se  $1/2 < \alpha < 1$  os passos são positivamente correlacionados e caso  $0 < \alpha < 1/2$  os passos são negativamente correlacionados. Isso torna toda a discussão dessa subseção intuitiva, pois se os passos são positivamente correlacionados eles necessariamente se distanciam da média mais rápido, aumentando a variância, porém o sistema é mais suave localmente, enquanto no caso oposto os passos têm uma tendência maior de serem executados em direções alternadas, concentrando a caminhada em torno da média, mas tornando-a mais irregular, como pode ser visto na Fig. 2.9(b).

## 2.5 Classes de universalidade no enrugamento cinético

Como discutimos acima, um conjunto de expoentes de escala  $\{\alpha, \beta, z\}$  define uma classe de universalidade, que pode, a princípio, conter uma vasta gama de sistemas. Relacionada à cada classe de universalidade temos uma equação estocástica que deve representar analiticamente a dinâmica das interfaces da classe em questão. Espera-se que essas equações

<sup>11</sup>Esse caso mais geral é definido pela integração do movimento Browniano ordinário, dado por:

$$B_\alpha(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha + 1/2)} \left( \int_{-\infty}^0 [(t-s)^{\alpha-1/2} - (-s)^{\alpha-1/2}] dB(s) + \int_0^t (t-s)^{\alpha-1/2} dB(s) \right) \quad ,$$

onde  $\Gamma(\gamma) = \int_0^\infty x^{\gamma-1} e^{-x} dx$  e  $B(s)$  é o movimento Browniano comum [46]. Note que  $\alpha = 1/2$  retorna o movimento Browniano ordinário.



## 2.5 Classes de universalidade



estocásticas sejam boas descrições no limite hidrodinâmico ( $L \rightarrow \infty$  e  $t \rightarrow \infty$ ). Como discutiremos ao longo dessa seção, devido à invariância de escala, no limite hidrodinâmico os modos vibracionais com grandes comprimentos de onda dominam a dinâmica da superfície, isso considerando a decomposição de  $h$  em uma série de Fourier.

Sendo mais preciso, por causa da semelhança entre o enrugamento cinético e os sistemas críticos, suas propriedades estatísticas devem ser invariantes sobre transformações do grupo de renormalização. Algumas das transformações envolvidas nesse processo de renormalização já apareceram brevemente em pontos desse texto. Basicamente, a renormalização segue três etapas. Primeiro é feito um *coarse graining*, onde é feita uma média sobre os modos vibracionais com comprimentos de onda menores que um valor arbitrário, qualitativamente é como se diminuíssemos a resolução de uma foto digital aumentando o tamanho do pixel. Em seguida, é feita uma reescala anisotrópica que comprime os comprimentos de onda restantes, isso no intuito de restaurar a “resolução” inicial da superfície. O resultado dessas duas operações é normalmente uma superfície mais irregular localmente, pois a reescala aproxima porções que estavam mais distantes antes de sua aplicação, isso é corrigido aplicando um fator de renormalização que corrige a amplitude dessa irregularidade local, que, no exemplo da foto, é equivalente a uma mudança no contraste no intuito de tentar obter uma imagem parecida com a original. Uma discussão mais extensa sobre esse assunto pode ser encontrada em [30,33].

Por causa dessa invariância sobre transformações do grupo de renormalização, no regime hidrodinâmico é desnecessário utilizar a Eq. 2.16 completa, pois nesse regime os termos vinculados a maiores comprimentos de onda dominam a dinâmica, limitando os demais a efeitos de *crossover* dependendo da razão entre os coeficientes de cada termo. Para verificar a relevância de uma derivada de ordem  $m$  no regime hidrodinâmico aplicamos a transformada de Fourier

$$\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int d^d x \nabla^m h(\vec{x}, t) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x})} = (i\vec{k})^m \tilde{h}(\vec{k}, t) \quad ,$$

onde  $\tilde{h}(\vec{k}, t)$  é a transformada de Fourier de  $h$ . Então, como  $k = 2\pi/\lambda$ , com  $\lambda$  sendo o comprimento de onda, fica evidente que quanto maior a ordem da derivada menos relevante ela é no regime hidrodinâmico. Para os termos não-lineares aparecem convoluções, como o termo  $(\nabla h)^2$ , onde aparece:

$$\Phi(\vec{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int \int d^d q \vec{q} \cdot (\vec{k} - \vec{q}) \tilde{h}(\vec{q}, t) \tilde{h}(\vec{k} - \vec{q}, t) \quad ,$$

que evidentemente vai para zero mais devagar que  $k^2$ , assim o termo  $(\nabla h)^2$  é mais relevante assintoticamente que  $\nabla^2 h$ . Não é difícil verificar que os termos mais a esquerda na Eq. 2.16 são mais relevantes em longos comprimentos de onda e os mais a direita são mais importantes em curtos comprimentos de onda.

Antes de começarmos a discutir sobre cada classe de universalidade especificamente, vamos apresentar as simetrias que uma interface deve satisfazer, pois, em geral, princípios de simetria são a principal forma de se construir equações em Física. De fato, as equações das classes podem ser construídas usando apenas as simetrias, porém na seção 2.3 decidimos tomar o caminho mais longo no intuito de discutir a origem e o papel de cada termo. As principais simetrias que uma superfície deve satisfazer são:

- Simetria sobre translações espaço-temporais. A interface deve ser invariante sobre as transformações:  $\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = \vec{x} + \vec{a}$ ;  $h \rightarrow h' = h + b$  e  $t \rightarrow t' = t + c$ . Essas simetrias impedem que os termos  $\vec{x}$ ,  $h$  e  $t$  apareçam explicitamente na equação.

## 2.5 Classes de universalidade



- Invariância sobre rotações  $\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = \mathbf{R}\vec{x}$ , onde  $\mathbf{R}$  é uma matriz de rotação. Um caso específico especialmente útil é  $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$ . Essa rotação faz  $\partial h/\partial x \rightarrow -\partial h/\partial x$ , por isso a equação deve envolver apenas derivadas espaciais de ordem par, ou derivadas de ordem ímpar elevadas a potências pares, por exemplo,  $\nabla^m h$  ou  $(\nabla h)^m$  com  $m$  par.
- Simetria sobre transformações de escala anisotrópicas, que é a invariância sobre a transformação simultânea de  $\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = b\vec{x}$ ,  $h \rightarrow h' = b^\alpha h$  e  $t \rightarrow t' = b^z t$ . Essa simetria está relacionada a auto-afinidade das estruturas formadas.

Nas subseções seguintes vamos discutir o desdobramento da equação 2.16 nas equações referentes a cada classe de universalidade.

### 2.5.1 A classe KPZ

A equação estocástica associada à essa classe foi proposta por Kardar, Parisi e Zhang (KPZ) em [47]. Eles construíram essa equação combinando o termo de tensão superficial com o de tendência de crescimento na direção normal à interface (localmente), como na Fig. 2.4. A equação proposta por KPZ tem a forma:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2 + \nu \nabla^2 h + \sqrt{D}\eta \quad , \quad (2.22)$$

onde  $\eta$  é um ruído não conservativo com propriedades dadas pela equação 2.17.

Como os termos dessa equação são os mais importantes no regime hidrodinâmico, podemos dizer que a Eq. 2.16 tende para a equação KPZ nesse limite. Portanto, espera-se que essa equação descreva uma gama especialmente grande de sistemas. De fato, é esperado que todo o crescimento local e não-conservativo pertença a esta classe, uma vez que o termo não-linear dessa equação é o único não-conservativo na Eq. 2.16 (além do ruído). Sendo assim, esse termo é o único que pode descrever  $\partial \langle h \rangle / \partial t \neq F$ . Além disso, note que a Eq. 2.22 é basicamente a adição de uma não-linearidade à equação de difusão estocástica, dada a abrangência da equação de difusão fica evidente que esse modelo é particularmente interessante.

A amplitude do alcance dessa classe de universalidade fica mais evidente quando consideramos os diversos mapeamentos que levam essa equação da dinâmica de interfaces a outros problemas aparentemente diferentes. É interessante comentar brevemente alguns desses mapeamentos, pois diversos resultados analíticos dessa classe foram obtidos através deles. A aplicação de uma transformação de Cole-Hopf [48], onde  $h \rightarrow h' = e^{\text{const} \times h}$ , leva a Eq. 2.22 na equação diferencial para a função de partição de um polímero em um meio aleatório

$$\frac{\partial Z_x(h)}{\partial x} = \frac{T}{2\nu} \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} - \frac{1}{T} \eta(x,h) Z \quad , \quad \text{onde } Z_x(h) = \int \mathcal{D}[h] e^{-\frac{1}{T} \int dx (\frac{\nu}{2} (\nabla h)^2 + \eta(x,h))} ,$$

onde  $x$  faz o papel do tempo e  $h$  da coordenada transversal. Nessa função de partição é considerado um termo de tensão que dá ao polímero uma tendência de ficar esticado, e o termo  $\eta$  é um potencial aleatório que induz um desvio dessa configuração linear em busca de regiões de baixa energia.

Outro mapeamento interessante é o que leva a equação KPZ ao escoamento de um fluido sem vorticidade. Esse mapeamento é interessante porque ele nos permite explorar uma simetria adicional da equação KPZ. Considerando o mapeamento  $\vec{v} = \nabla h$ , onde  $\vec{v}(\vec{x}, t)$  é a

## 2.5 Classes de universalidade



velocidade de escoamento do fluido, obtemos a equação de Burgers [49] estocástica

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

Como essa equação descreve um problema de mecânica, ela deve ser invariante sobre uma transformação de Galileu, dada por  $\vec{v} \rightarrow \vec{v}_0 + \vec{v}'(\vec{x} - \vec{v}_0 t)$ . A invariância sobre essa transformação significa que as leis envolvidas na dinâmica do fluido não mudam se ele for estudado em um referencial que se move com velocidade  $\vec{v}_0$  em relação à tubulação. Essa simetria da equação de Burgers nos indica que a equação KPZ deve ser invariante sobre transformações de inclinação com a forma  $h \rightarrow h' = h + a\vec{x}$  e  $x \rightarrow x' = x - \lambda at$ .

Explorando essa simetria sobre inclinação da equação KPZ podemos obter uma relação entre os seus expoentes de escala. Aplicando nessa equação uma transformação de escala anisotrópica, dada pela Eq. 2.20, obtemos a seguinte equação:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu' b^{z-2} \nabla^2 h + \frac{\lambda'}{2} b^{\alpha+z-2} (\nabla h)^2 + b^{-d/2+z/2-\alpha} \sqrt{D'} \eta \quad . \quad (2.23)$$

Mesmo sem saber como os parâmetros mudam sobre essa reescala, uma vez que a transformação de inclinação envolve explicitamente o  $\lambda$ , a simetria sobre essa transformação implica que  $\lambda'$  não pode depender dos demais parâmetros. Portanto, o expoente de  $b$  referente ao termo não-linear deve se anular para a invariância de escala ser satisfeita. Isso nos retorna a seguinte relação de escala para os expoentes  $\alpha$  e  $z$ :

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

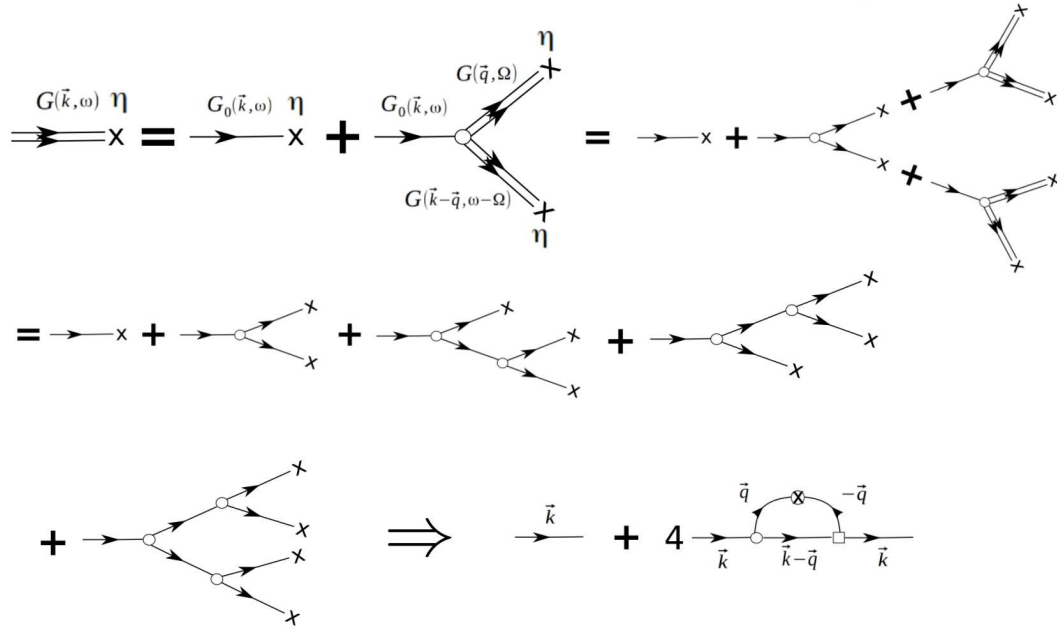
Para obtermos explicitamente os expoentes da classe KPZ em uma dimensão, é necessário aplicar o grupo de renormalização dinâmico em busca de pontos fixos nas equações de fluxo dos parâmetros. Esse cálculo é relativamente extenso, por isso vamos apresentar apenas a ideia geral e o resultado. Considerando a discussão da subseção anterior, pode-se mostrar que a equação KPZ no espaço de Fourier é dada por

$$\tilde{h}(\vec{k}, \omega) = \frac{\sqrt{D} \tilde{\eta}(\vec{k}, \omega)}{\nu k^2 - i\omega} - \frac{\lambda}{2(\nu k^2 - i\omega)} \int \int \frac{d^2 q d\Omega}{(2\pi)^{\frac{d+1}{2}}} \vec{q} \cdot (\vec{k} - \vec{q}) \tilde{h}(\vec{q}, t) \tilde{h}(\vec{k} - \vec{q}, t) \quad . \quad (2.25)$$

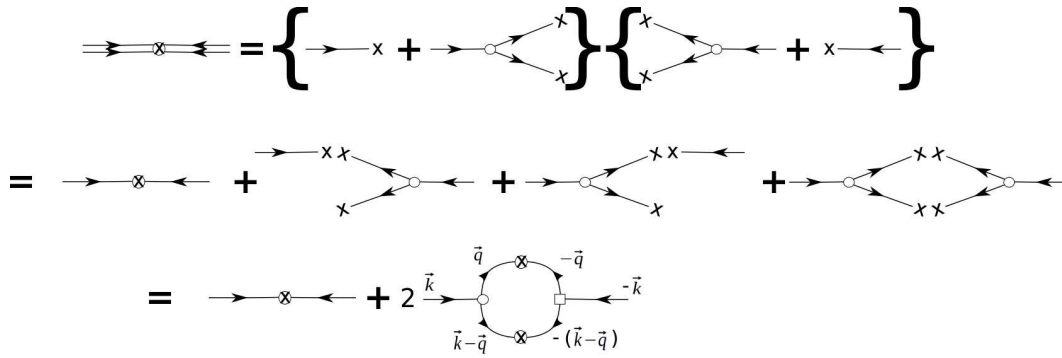
Note que essa equação relaciona  $\tilde{h}(\vec{k}, \omega)$  com sua própria integral, o que chamamos de equação integral. Assim ela pode ser resolvida iterativamente substituindo o lado direito da equação nos termos  $\tilde{h}$  de dentro da integração, o que é efetivamente uma expansão em  $\lambda$ . Essa substituição produz equações muito grandes, por isso é mais vantajoso realizar esse cálculo utilizando uma representação diagramática. Nesse contexto, basta calcular o diagrama vinculado a cada termo e verificar como ele se altera sobre renormalização. A Fig. 2.10 apresenta uma explicação rápida sobre essa representação diagramática e os diagramas importantes em um loop. Uma discussão mais detalhada pode ser encontrada em [33].

Na primeira equação da Fig. 2.10(a) representamos a Eq. 2.25 na forma diagramática. Nela  $\tilde{h}$  é dado pela operação de um propagador  $G$  sobre o ruído, ou seja,  $\tilde{h}(\vec{k}, \omega) = G(\vec{k}, \omega) \eta$ , onde o lado direito dessa equação é igual ao lado direito da equação 2.25. A expansão se dá substituindo o diagrama dentro dele mesmo. Isso é feito inserindo o diagrama inteiro do lado direito da primeira equação nos lugares onde há uma seta dupla, que é efetivamente expandir  $G(\vec{k}, \omega)$  (representado por uma seta dupla) em função de  $G_0(\vec{k}, \omega)$  (uma seta) e o próprio  $G(\vec{k}, \omega)$ . Essa operação é representada na última parcela da primeira linha. Essa expansão

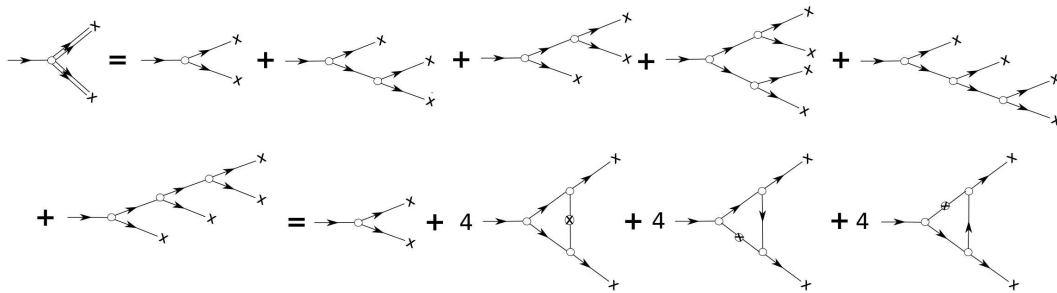
## 2.5 Classes de universalidade



(a)



(b)



(c)

**Figura 2.10:** (a) representação diagramática da Eq. 2.25 escrita na forma diagramática. (b) Diagrama referente ao  $D$  efetivo. (c) Diagrama associado ao  $\lambda$  efetivo.

iterativa é truncada quando substituímos  $G_0(\vec{k}, \omega)\eta = \frac{\sqrt{D}\tilde{\eta}(\vec{k}, \omega)}{\nu k^2 - i\omega}$  no lugar de  $G(\vec{k}, \omega)\eta$ .

Fazendo um passo dessa iteração chegamos nos quatro vértices da segunda linha e no

## 2.5 Classes de universalidade



primeiro da terceira linha da Fig. 2.10(a). A etapa final envolve multiplicar os dois lados por  $\eta$  e tomar a média. Lembrando que como  $\langle \eta \rangle = 0$  os vértices que tinham um número par de  $\eta$ 's antes da multiplicação se anulam. Já os com número ímpar são simplificados usando  $\langle \eta(\vec{k}, \omega) \eta(\vec{k}', \omega') \rangle = (2\pi)^2 \delta(\vec{k} + \vec{k}') \delta(\omega + \omega')$ , onde essa correlação é representada pelo círculo cruzado (Fig. 2.10(b)), e o quadrado representa uma integração já executada, por isso a seta da direita tem  $-\vec{q}$  na última parcela da Fig. 2.10(a). O fator quatro que aparece na última equação é devido ao número de formas diferentes de se produzir esse mesmo diagrama. Traduzindo de volta para a representação matemática usual obtemos um propagador com o formato  $G = 1/(\tilde{\nu}k^2)$  com  $\tilde{\nu}$  efetivo dado por

$$\tilde{\nu} = \nu \left[ 1 + \frac{\lambda^2 D}{\nu^3} \frac{d-2}{4} K_d \int dq q^{d-3} \right],$$

onde  $K_d = S_d/(2\pi)^d$  com  $S_d$  sendo a área superficial de uma esfera de  $d$  dimensões. A análise de como esse  $\tilde{\nu}$  se altera sobre renormalização nos dá a sua equação de fluxo.

Para obter o  $\tilde{D}$  é necessário avaliar o diagrama de Fig. 2.10(b). Seguindo uma abordagem análoga chegamos à

$$\tilde{D} = D \left[ 1 + \frac{\lambda^2 D}{\nu^3} \frac{K_d}{4} \int dq q^{d-3} \right].$$

O vértice na Fig. 2.10(c) está relacionado com  $\tilde{\lambda}$ . Na última equação a soma da contribuição dos três últimos vértices se anula e o resultado é que  $\tilde{\lambda} = \lambda$ , que é consequência da invariância de Galileu.

Para aplicar a renormalização sobre essas equações para os parâmetros efetivos, primeiramente integramos os comprimentos de onda pequenos no intervalo  $\Lambda/b < k < \Lambda$ , onde  $\Lambda$  é o corte introduzido pelo *coarse graining* prévio, pois as equações estocásticas já assumem um *coarsening* inicial para que  $h(x,t)$  seja suave. Em seguida, é feita a reescala usando  $b = e^l$  para restaurar o corte no espaço de Fourier para  $\Lambda$ . O efeito dessa reescala sobre os parâmetros é evidente pela equação 2.23. O resultado dessas duas etapas são as equações de fluxo:

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda}{dl} &= \lambda(\alpha + z - 2), \\ \frac{d\nu}{dl} &= \nu \left[ z - 2 + K_d \frac{2-d}{4d} \left( \frac{\lambda^2 D}{\nu^3} \right)^2 \right], \\ \frac{dD}{dl} &= D \left[ z - d - 2\alpha + K_d \frac{1}{4} \left( \frac{\lambda^2 D}{\nu^3} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

A invariância de escala do enrugamento cinético acontece no ponto fixo dessas equações de fluxo, ou seja, quando  $d\lambda/dl = d\nu/dl = dD/dl = 0$ . Note que a primeira equação de fluxo mostra que  $\lambda$  renormaliza independente dos demais parâmetros e que  $\alpha + z = 2$ , que são consequências diretas da simetria sobre inclinação.

Para lidar com as equações de fluxo para  $D$  e  $\nu$  definimos a constante de acoplamento  $g^2 = \lambda^2 D/\nu^3$ . Em uma dimensão a combinação das equações de fluxo implica em:

$$\frac{dg}{dl} = \frac{g}{2} - \frac{g^3}{4},$$

## 2.5 Classes de universalidade



que possui ponto fixo atrativo em  $g = \sqrt{2}$ . Usando esse valor de  $g$  nas Eq. 2.26 em uma dimensão obtemos:

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

Em dimensões maiores essa expansão até  $\lambda^2$  não funciona bem e, portanto, os expoentes não são conhecidos exatamente. Em duas dimensões, as estimativas numéricas mais recentes nos dão os expoentes  $\alpha = 0,3869(4)$ ,  $\beta = 0,2415(15)$  e  $z = 1,6131(4)$  [50,51].

### 2.5.2 A classe EW

A equação estocástica para esta classe de universalidade foi proposta por Edward e Wilkinson (EW) [52]. Na construção dessa equação eles consideraram apenas o efeito da tensão superficial, ou seja:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \sqrt{D} \eta \quad . \quad (2.27)$$

Essa equação deve ser relevante em interfaces onde o termo  $(\nabla h)^2$  é suprimido por algum motivo. Como já comentado, esse termo não aparece em crescimentos conservativos, logo a equação EW 2.27 se torna um modelo analítico muito importante para interfaces com essa condição. Além disso, o “termo KPZ” também pode ser eliminado se a superfície possuir simetria *up-down*, que é quando a interface é invariante sobre a transformação  $h \rightarrow h' = -h$ , onde é fácil notar que o lado esquerdo da na Eq. 2.22 muda de sinal enquanto o lado direito não muda e na Eq. 2.27 ambos os lados mudam de sinal, satisfazendo essa simetria.

Quando calculamos a Eq. 2.16 vimos que o termo  $\nabla \cdot (\nabla h)^3$  também está relacionado à tensão superficial, sendo uma correção de ordem superior. Dessa forma, esse termo não adiciona um mecanismo diferente à dinâmica. Além disso, ele é menos relevante no regime hidrodinâmico. Por esses motivos ele é normalmente desconsiderado.

Como a equação EW é linear, é relativamente mais fácil obter resultados analíticos para essa classe. Apesar de existir outros caminhos mais simples, os expoentes de escala podem ser extraídos das equações de fluxo 2.26 fazendo  $\lambda = 0$ . Isso resulta em  $dv/dl = \nu(z - 2)$  e  $dD/dl = D(z - d - 2\alpha)$ . Assim, fica evidente que ambos os parâmetros renormalizam de forma independente. Além disso, os expoentes são dados por:

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

Note que a dimensão crítica superior dessa equação é  $d = 2$ , pois  $\alpha$  e  $\beta$  zeram nesse caso, o que significa que as leis de potência referentes a esses expoentes se tornam logaritmos. Então, a rugosidade inicialmente escala com o logaritmo do tempo e satura com o logaritmo do tamanho do sistema. Acima de duas dimensões o ruído se torna irrelevante perante a tensão superficial, onde qualquer flutuação introduzida pelo ruído é rapidamente corrigida pela tensão superficial, eliminando o enrugamento cinético e levando à interfaces lisas.

Como um comentário final, note que a equação EW é a equação de difusão estocástica. Em uma dimensão, a interface produzida tem  $\alpha = 1/2$ , o que significa que ela tem a mesma morfologia de um movimento Browniano ordinário. Em escalas  $l \ll \xi$ , ou no regime de saturação, o mesmo ocorre com a classe KPZ, onde também temos  $\alpha = 1/2$  em  $d = 1$ .

### 2.5.3 A classe VLDS

A equação dessa classe foi proposta independentemente por Villain [53] e por Lai e Das Sarma [54]. O objetivo deles era desenvolver um bom modelo para crescimentos dominados

## 2.5 Classes de universalidade



por difusão. A equação VLDS é dada por:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \lambda_4 \nabla^2 (\nabla h)^2 - \nu_4 \nabla^4 h + \sqrt{D} \eta \quad , \quad (2.28)$$

Como já comentado, o termo  $\nabla^4 h$  está associado a uma corrente em direção aos mínimos de potencial químico, e espera-se que o termo  $\nabla^2 (\nabla h)^2$  seja importante quando a difusão não distinguir a subida da descida de degraus [31].

Essa classe vai ser uma candidata a descrever o enrugamento cinético quando os termos das classes EW e KPZ forem irrelevantes. Como essas duas classes estão intimamente ligadas aos efeitos de deposição e dessorção, seus termos devem ser irrelevantes em ambientes onde dessorção é rara e as partículas que chegam à interface difundem um comprimento considerável antes de agregar. Um exemplo de sistema que pode se aproximar dessas condições é o crescimento de um filme fino por MBE, onde tipicamente a temperatura do substrato é alta o suficiente para que a difusão ocorra com facilidade e baixa o bastante para que a dessorção seja irrelevante. Por essa razão, essa classe também é conhecida como MBE não linear (nMBE).

Apesar de ser possível minimizar os termos KPZ e EW, se eles não forem identicamente nulos, no regime assintótico eles necessariamente dominam a dinâmica. Sendo assim, em tempos muito grandes quando as flutuações de longos comprimentos de onda se tornam dominantes, um suposto crescimento com difusão e conservativo vai se tornar EW, enquanto o caso não conservativo se tornaria KPZ. No entanto, dependendo da razão entre os parâmetros referentes a cada termo, esse *crossover* pode demorar um tempo muito grande para acontecer, fazendo com que a dinâmica siga a equação VLDS por uma janela de tempo razoável, que pode inclusive ser extensa o suficiente para descrever um suposto sistema durante todo o seu intervalo de interesse.

O cálculo dos expoentes da classe VLDS pode ser feito através do grupo de renormalização dinâmico. Ele segue a mesma ideia que o cálculo para a classe KPZ. O resultado para um loop são as equações de fluxo:

$$\frac{d\lambda_4}{dl} = \lambda_4(z + \alpha - 4) \quad , \quad \frac{d\nu}{dl} = \nu \left( z - 4 + K_d \frac{\lambda_4^2 D}{\nu_4^3} \frac{6-d}{4d} \right) \quad \text{e} \quad \frac{dD}{dl} = D(z - 2\alpha - d).$$

Essas equações mostram que  $D$  e  $\lambda_4$  renormalizam de forma independente. De suas equações é fácil tirar os expoentes em função da dimensão do espaço, onde

$$\alpha = \frac{4-d}{3} \quad , \quad \beta = \frac{4-d}{8+d} \quad \text{e} \quad z = \frac{8+d}{3} \quad .$$

Ao contrário da classe KPZ, aqui a renormalização resulta em expoentes para qualquer dimensão. No entanto, existem evidências que as correções de ordem superiores são relevantes [55,56]. Essas correções foram calculadas analiticamente via renormalização de dois laços, resultando nos expoentes  $\alpha = (4-d)/3 - \delta$ ,  $z = (8+d)/3 - 2\delta$  e  $\beta = (4-d-3\delta)/(8+d-6\delta)$ , com  $\delta = 0,01361(2-d/2)^2$  [55]. Como comentário final, note que a dimensão crítica superior é quatro, maior que o caso bidimensional de interesse para a deposição de filmes finos.

## 2.6 Universalidade além dos expoentes de escala



### 2.5.4 A classe MH

A versão determinística da equação dessa classe foi inicialmente estudada por Mullins e Herring (MH) [59,60]. Com o termo de ruído, a equação de MH toma a forma

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu_4 \nabla^4 h + \sqrt{D} \eta.$$

Essa classe deve ser importante quando o crescimento difusivo possuir simetria *up-down*. A mesma discussão sobre o regime assintótico, onde os efeitos de deposição e desorção superam a difusão, se aplica a essa classe. Com a diferença que se o *crossover* mantiver as simetrias da superfície, ele deverá ser para a classe EW.

Os expoentes dessa classe podem ser obtidos das equações de fluxo da classe VLDS com  $\lambda_4 = 0$ . O resultado é que os coeficientes  $\nu_4$  e  $D$  renormalizam de forma independente e os expoentes são dados por:

$$\alpha = \frac{4-d}{2} \quad , \quad \beta = \frac{4-d}{8} \quad \text{e} \quad z = 4 \quad .$$

Note que a equação MH produz expoentes  $\alpha$ 's muito grandes, com  $\alpha = 1,5$  em uma dimensão por exemplo. Sendo assim, a difusão com simetria *up-down* está relacionada a interfaces que são muito lisas localmente e muito rugosas globalmente.

### 2.5.5 A classe RD

Finalmente, a equação estocástica mais simples que se pode imaginar é

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \eta(\vec{x}, t) \quad , \quad (2.29)$$

que é uma deposição totalmente aleatória. Portanto, não há propagação de correlações na superfície e a rugosidade cresce indefinidamente, mesmo em um sistema finito. Por isso,  $\alpha = \frac{d}{2}$  e  $z = \frac{d}{2}$ .

A equação 2.29 é fácil de se resolver. Integrando no tempo temos que  $h(\vec{x}, t) = \int_0^t \eta(\vec{x}, t') dt'$ . Usando as propriedades do ruído (Eq. 2.17) é trivial obter  $\langle h \rangle = 0$  e  $\langle h^2 \rangle = 2Dt$ , o que leva a  $\beta = 1/2$ . Note que, como cada posição da interface não sofre efeitos da sua vizinhança, a dimensionalidade do espaço é irrelevante para os expoentes dessa equação/classe.

## 2.6 Universalidade além dos expoentes de escala

Até agora, exploramos apenas a rugosidade da superfície, separando fenômenos pelo conjunto de expoentes do enrugamento cinético. De fato, são os expoentes de escala que definem a classe de universalidade em última instância. No entanto, há muitas outras quantidades universais importantes que podem ser exploradas. Nesta seção, vamos apresentar algumas delas.

### 2.6.1 Universalidade da distribuição de alturas

Visto que a rugosidade quadrática ( $W_2$ ) é apenas o segundo cumulante da distribuição de altura (Height Distribution – HD), é natural se perguntar se as distribuições de alturas como um todo são universais. Como a altura média deve aumentar de acordo com o fluxo



## 2.6 Universalidade além dos expoentes de escala



constante de partículas, e  $W \sim t^\beta$ , é razoável que a altura em um certo ponto da superfície evolua de acordo com o seguinte ansatz:

$$h = v_\infty t + (\Gamma t)^\beta \chi + \dots \quad (2.30)$$

onde  $v_\infty$  e  $\Gamma$  são parâmetros não-universais que devem estar associados aos coeficientes da equação estocástica, e  $\chi$  é uma variável aleatória. Nesse ansatz a altura é escrita como a combinação de um termo determinístico  $v_\infty t$  e um termo estocástico  $(\Gamma t)^\beta \chi$ , as reticências representam possíveis correções de tempo finito nesse ansatz, que de fato são relevantes como veremos adiante. Dessa forma, o  $v_\infty$  está relacionado a uma espécie de velocidade de crescimento assintótica, e o  $\Gamma$  regula a amplitude das flutuações introduzidas pela variável aleatória  $\chi$ . Quando a HD for universal, a função densidade de probabilidade da variável  $\chi$  deve possuir a mesma forma para todas as interfaces contidas numa determinada classe, onde as particularidades de cada sistema estarão contidas nos parâmetros não universais e nas correções.

Para fazer análises quantitativas detalhadas de distribuições, usualmente utiliza-se seus momentos e/ou cumulantes, além de razões adimensionais desses. Os momentos de uma variável aleatória qualquer  $X$  são definidos por

$$\langle X^n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i^n, \quad (2.31)$$

onde  $n$  é a ordem do momento, e  $N$  é o número de pontos da amostragem. Os cumulantes da distribuição podem ser escritos como combinações lineares dos momentos que, até a quarta ordem, são:

$$\begin{aligned} \langle X \rangle_c &= \langle X \rangle; \\ \langle X^2 \rangle_c &= \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2; \\ \langle X^3 \rangle_c &= \langle X^3 \rangle - 3\langle X^2 \rangle \langle X \rangle + 2\langle X \rangle^3; \\ \langle X^4 \rangle_c &= \langle X^4 \rangle - 4\langle X^3 \rangle \langle X \rangle - 3\langle X^2 \rangle^2 + 12\langle X^2 \rangle \langle X \rangle^2 - 6\langle X \rangle^4. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Das diversas razões adimensionais desses cumulantes que podemos definir, três que foram extensamente utilizadas ao longo dessa tese são:

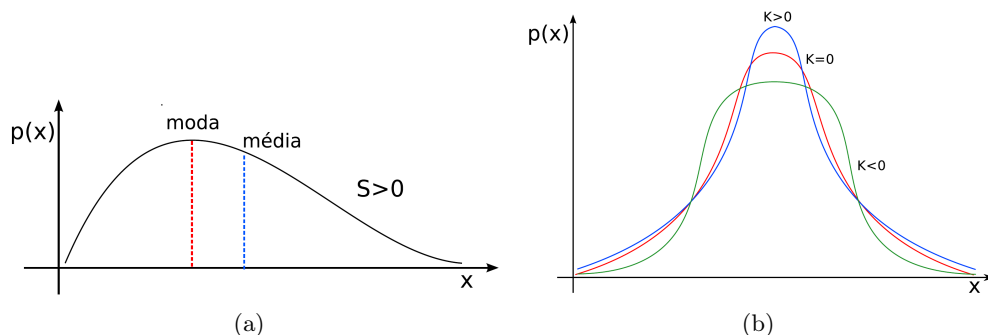
$$R = \frac{\sqrt{\langle X^2 \rangle_c}}{\langle X \rangle_c}; \quad S = \frac{\langle X^3 \rangle_c}{\langle X^2 \rangle_c^{3/2}} \quad \text{e} \quad K = \frac{\langle X^4 \rangle_c}{\langle X^2 \rangle_c^2}. \quad (2.33)$$

A razão  $R$  é o coeficiente de variação, a  $S$  é o coeficiente de assimetria da distribuição, ou *Skewness*, e  $K$  é a *Kurtosis*, que nos dá informação sobre o peso das caudas da distribuição. Na Fig. 2.11 apresentamos uma ilustração que relaciona qualitativamente o valor dessas duas últimas razões e a forma da distribuição.

Antes de ser proposto um ansatz como 2.30, já se sabia que nas classes lineares a HD deveria ser Gaussiana [29]. Além disso, todos os crescimentos conservativos possuem  $\langle h \rangle = Ft$ , logo, apenas crescimentos KPZ devem ter  $v_\infty \neq F$  e  $\langle \chi \rangle \neq 0$ . Dessa forma, nas classes lineares  $h = Ft + (\Gamma t)^\beta \chi + \dots$ , onde  $\chi$  é uma Gaussiana de média nula e variância universal.

Note que, por construção, o ansatz 2.30 só vale no regime de crescimento da rugosidade, onde  $W_2 = \langle h^2 \rangle_c \sim t^{2\beta}$ . No regime de saturação a forma da distribuição pode inclusive mudar, como no exemplo KPZ em  $d = 1$ , onde de acordo com o teorema de flutuação-dissipação [33]

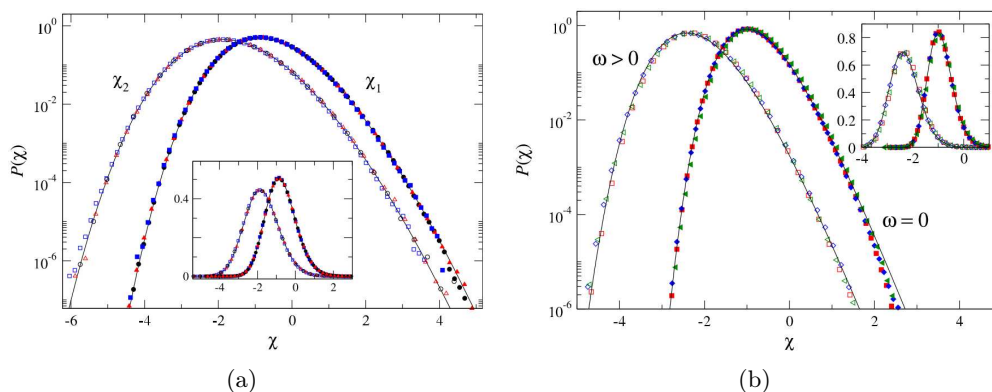
## 2.6 Universalidade além dos expoentes de escala



**Figura 2.11:** (a) ilustração da assimetria da distribuição quando  $S > 0$ , refletindo a curva entorno da média produz-se a forma qualitativa de uma distribuição com  $S < 0$ . (b) Formas de distribuições simétricas ( $S = 0$ ) com diferentes  $K$ 's, onde  $K = 0$  é uma Gaussiana. Distribuições com  $K < 0$  são mais concentradas em torno do pico, com caudas que tendem a zero mais rapidamente, e naquelas com  $K > 0$  acontece o contrário.

a distribuição se torna uma Gaussiana.

Obter a distribuição de  $\chi$  para as classes não lineares é uma tarefa mais difícil. Ao contrário da classe KPZ, para VLDS existem poucos resultados sobre a sua HD. Existem estimativas numéricas da *Skewness* e da *Kurtosis* no estado estacionário [56,57], e cálculos de renormalização recentes com um loop para a *Skewness* no regime de crescimento [58] em uma dimensão.



**Figura 2.12:** (a) Comparação da distribuição de  $\chi$  para diferentes modelos da classe KPZ em  $d = 1$  com as distribuições referentes à GOE ( $\chi_1$ ) e GUE ( $\chi_2$ ), os símbolos cheios são resultados para geometria plana e os vazados para “curva” (mais detalhes no próximo capítulo). (b) O mesmo para duas dimensões, onde a linha sólida da esquerda é a distribuição de Gumbel generalizada com  $m = 9,5$  e a da direita  $m = 6$ . Figura extraída de [16].

Para a classe KPZ em  $d = 1$ , essa árdua tarefa foi realizada em uma sequência de trabalhos muito interessantes. Primeiro, Johansson e colaboradores mostraram que a maior subsequência crescente de uma permutação aleatória está vinculada às distribuições de Tracy-Widom (TW) [61] da teoria de matrizes aleatórias [62]. Esse trabalho chamou a atenção para a possibilidade de descrever diversos modelos combinatórios pelas distribuições TW. No ano seguinte, Johansson mostrou que as flutuações na variável  $\chi$  do ansatz 2.30 para um modelo (KPZ) similar ao Single Step (definido no próximo capítulo) em geometria curva são dadas

## 2.6 Universalidade além dos expoentes de escala



pela distribuição de TW para um ensemble Gaussiano unitário (Gaussian unitary ensemble – GUE) [65]. Pouco depois, resolvendo o modelo *polynuclear growth* (PNG) [63,64], que também pertence a classe KPZ, Prähofer e Spohn mostraram que a variável  $\chi$  em geometria plana é relacionada à distribuição de TW para um ensemble Gaussiano ortogonal (Gaussian orthogonal ensemble – GOE), enquanto em geometria curva ela é dada por GUE, e partindo de uma condição inicial estacionária<sup>12</sup> ela é dada pela distribuição de Baik-Rains [9]. Esses resultados mostram que, apesar dos expoentes de escala serem independentes da geometria, a curvatura global da interface afeta a HD, subdividindo a classe KPZ em subclasses dependendo da geometria da interface em larga escala. Esses resultados foram confirmados por experimentos de turbulência em filmes de cristal-líquido [10–12] e em diversas simulações [13–15]. Essa diferença também foi observada em  $d = 2$  dimensões [66–68], onde, apesar de ainda não existir resultados analíticos, a distribuição de Gumbel [69] pareceu ser um ótimo ponto de partida, visto que essa distribuição com  $m = 6$  se ajusta muito bem àquelas obtidas no caso plano, e  $m = 9,5$  para o caso curvo. A Fig. 2.12 mostra a diferença das distribuições de altura em uma e duas dimensões, para as duas geometrias, e ilustra sua universalidade, comparando diferentes modelos com as curvas analíticas. Finalmente, é interessante notar que apesar da distribuição de alturas em  $d = 1$  ter sido obtida através da solução de modelos no ano 2000, apenas em torno de 2010 que a solução direta da equação foi obtida para as duas geometrias [70,71].

Neste ponto é importante fazermos uma breve discussão sobre matrizes aleatórias. Basicamente, uma matriz aleatória dos ensembles Gaussianos é construída fazendo com que cada entrada dela seja uma variável Gaussiana real (complexa)  $N(0,1)$  e exigindo que ela seja invariante sobre uma transformação ortogonal (unitária), por isso o ensemble se chama GOE (GUE), o que produz uma matriz simétrica (hermitiana). Esses ensembles estão relacionados com a generalização do movimento Browniano para matrizes, conhecido como movimento browniano de Dyson [72]. Supondo uma matriz  $A(t)$  hermitiana  $N \times N$ , o movimento browniano de Dyson evolui essa matriz através de:

$$A(t + dt) = A(t) + \sqrt{dt} G \quad ,$$

onde  $G$  é uma matriz do ensemble Gaussiano unitário. Essa equação possui a mesma forma para o caso de uma matriz que passeia pelo espaço das matrizes simétricas, com a diferença que  $G$  passa a ser uma matriz do GOE. O movimento Browniano dessa matriz  $A(t)$  resulta na evolução estocástica de seus auto valores  $(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ . Como mostrado por Dyson, esses autovalores evoluem de acordo com:

$$d\lambda_j(t) = \left( -\lambda_j(t) + \frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{\lambda_j(t) - \lambda_i(t)} \right) dt + dB_j(t) \quad ,$$

onde  $dB_j = N(0, dt)$  é o incremento de um movimento browniano usual,  $\beta = 1$  para GOE e  $\beta = 2$  para GUE. Na verdade, também existe o ensemble Gaussiano simplético (Gaussian symplectic ensemble – GSE), envolvendo matrizes quaterniônicas<sup>13</sup>, com  $\beta = 4$ . Assim, note

<sup>12</sup>Sendo mais específico, partindo de uma condição inicial  $h(x,0)$  dado por um movimento browniano com constante de difusão que resulte na amplitude da rugosidade de saturação de um dado sistema, ou simplesmente considerando uma configuração do próprio sistema no estado estacionário como condição inicial, a diferença  $h(x,t) - h(x,0)$  será dada pelo ansatz 2.30 com  $\chi$  sendo a distribuição de Baik-Rains.

<sup>13</sup>Matrizes compostas por quatérnios, que são uma espécie de generalização dos números complexos. Um quatérnio é dado por:

$$M = a + bi + cj + dk,$$

## 2.6 Universalidade além dos expoentes de escala



que a evolução dos autovalores é análoga à dinâmica de um conjunto de caminhantes aleatórios espalhados pela reta real sobre o efeito de um potencial harmônico e mutuamente repulsivos. Através da equação de Fokker-Planck<sup>14</sup>, a distribuição estacionária dos autovalores é

$$P(\lambda_1, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{Z} \left| \prod_{1 \leq i < j \leq N} (\lambda_j - \lambda_i) \right|^\beta \exp \left( - \sum_{j=1}^N \lambda_j^2 \right) ,$$

onde  $Z$  é apenas um fator de normalização.

As distribuições  $\chi_1$  e  $\chi_2$  que apresentamos na Fig. 2.12 são a distribuição do maior autovalor das matrizes aleatórias simétricas e hermitianas, respectivamente. Nos capítulos seguintes, por simplicidade, os termos GOE e GUE vão ser usados para nos referir a essas distribuições de  $\chi_1$  e  $\chi_2$ , e não aos ensembles propriamente ditos.

### 2.6.2 Covariâncias espaciais e temporais

Do ponto de vista mais fundamental, toda a riqueza observada nos fenômenos de crescimento é fruto da forma com que as informações se propagam na superfície, produzindo correlações de longo alcance no espaço e no tempo. Uma forma de acessar essa informação é através das covariâncias espacial e temporal, definidas por:

$$C_s(r, t) = \langle \hat{h}(\vec{x}, t) \hat{h}(\vec{x} + \vec{r}, t) \rangle \simeq (\Gamma t)^{2\beta} \Psi \left[ A |r|^{2\alpha} / (\Gamma t)^{2\beta} \right] \quad (2.34)$$

$$C_t(t, t_0) = \langle \hat{h}(x, t_0) \hat{h}(x, t) \rangle \simeq (\Gamma^2 t_0 t)^\beta \Phi(t/t_0) \quad (2.35)$$

onde  $\hat{h} = h - \bar{h}$ ,  $A$  define a amplitude da rugosidade no estado estacionário (isso será mais explorado adiante),  $\Psi$  e  $\Phi$  são funções de escala. Do ponto de vista estatístico, o ansatz 2.30 não especifica completamente o processo estocástico  $h(t)$ , porque especificamos apenas a distribuição individual de cada ponto  $h(x)$  para um dado tempo, sem especificar a distribuição conjunta deles.

Para a classe KPZ em  $d = 1$ , foi mostrado analiticamente que a forma da função de escala  $\Psi$  depende da curvatura. As covariâncias são dadas pelo determinante de Fredholm de *kernels* que envolvem a função de Airy. Para ilustrar brevemente, a função  $F_2(\sigma)$  (distribuição de probabilidade acumulada do que chamamos de  $\chi_2$  na Fig. 2.12) é dada pelo determinante de Fredholm [74]

$$F_2(\sigma) = \det(I - A_\sigma), \quad \text{onde} \quad A_\sigma u(x) = \int_\sigma^\infty K(x, y) u(y) dy, \\ \text{com} \quad K(x, y) = \int_0^\infty \text{Ai}(x+z) \text{Ai}(y+z) dz \quad ,$$

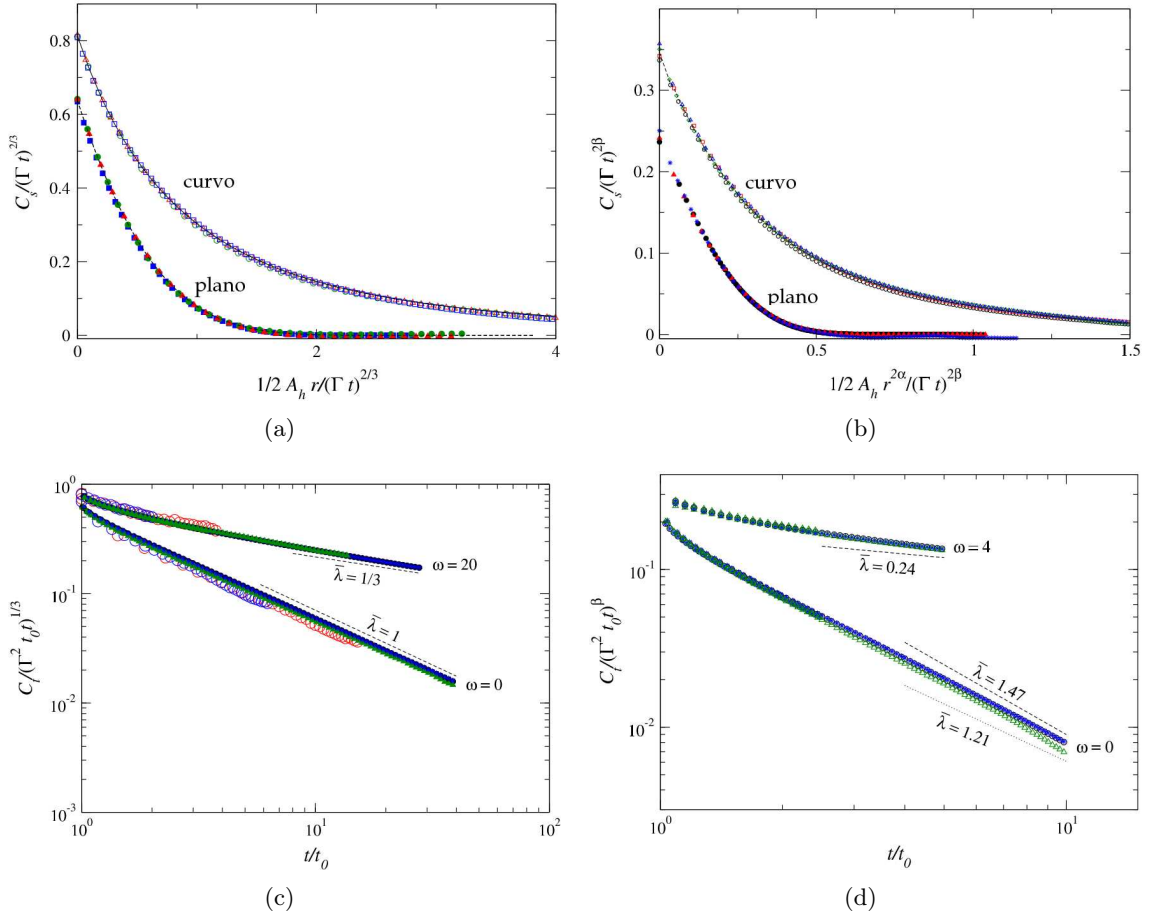
onde  $\text{Ai}$  é a função de Airy e  $u$  é apenas uma função de teste. O trabalho [75] apresenta

onde  $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ , e  $i, j, k$  são uma espécie de vetores unitários imaginários, que satisfazem  $i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$ .

<sup>14</sup>Supondo um conjunto de processos estocásticos  $x = \{x_1, \dots, x_n\}$  com dinâmica  $\dot{x}_i = f_i(x) + \eta_i(t)$ , com  $\langle \eta_i(t) \rangle = 0$  e  $\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = D_i \delta_{ij} \delta(t - t')$ , a distribuição de probabilidade vai obedecer à equação de Fokker-Planck, dada por:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} (f_i P) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N D_i \frac{\partial^2 P}{\partial x_i^2} .$$

## 2.6 Universalidade além dos expoentes de escala



**Figura 2.13:** (a) Comparação das covariâncias  $\text{Airy}_1$  e  $\text{Airy}_2$  (linhas) com as covariâncias de diferentes modelos de crescimento discretos em geometria plana (símbolos cheios) e curva (vazados) em uma dimensão. (b) Colapso da covariância espacial de interfaces de diferentes modelos e condições iniciais KPZ em  $d = 2$ . (c) Comparação entre a covariância temporal de diversos modelos em  $d = 1$  e experimentos de cristal líquido [10–12], sobre a curva assinalada por  $\omega = 0$  estão sistemas planos e em  $\omega = 20$  curvos,  $\bar{\lambda}$  é o expoente do decaimento. (d) Covariância temporal para duas dimensões,  $\omega = 0$  e  $\omega = 4$  são os casos plano e curvo, respectivamente. Todos os resultados são para modelos KPZ. Figura extraída de [16].

formas numéricas de se calcular esse determinante de Fredholm, além de uma revisão bem compreensível sobre o assunto. A covariância espacial pode ser obtida do que passou a ser chamado por processo de  $\text{Airy}_2$  ( $\mathcal{A}_2$ ) para o caso curvo. A  $\text{cov}(\mathcal{A}_2(r), \mathcal{A}_2(0))$  pode ser obtida da probabilidade conjunta

$$\mathcal{P}(\mathcal{A}_2(r) \leq \sigma_1, \mathcal{A}_2(r) \leq \sigma_2) = \det \left( I - \begin{pmatrix} A_0 & A_r \\ A_{-r} & A_0 \end{pmatrix} \right),$$

onde  $A_r$  possui o kernel [79,80]:

$$K_r(x, y) = \begin{cases} \int_0^\infty e^{zr} \text{Ai}(x+z) \text{Ai}(y+z) dz & , \text{ se } r > 0 \\ - \int_{-\infty}^0 e^{-zr} \text{Ai}(x+z) \text{Ai}(y+z) dz & , \text{ caso contrário} \end{cases}.$$

## 2.6 Universalidade além dos expoentes de escala



De posse dessa probabilidade conjunta basta fazer:

$$\text{cov}(\mathcal{A}_2(r)\mathcal{A}_2(0)) = \langle \mathcal{A}_2(r)\mathcal{A}_2(0) \rangle - \langle \mathcal{A}_2(r) \rangle \langle \mathcal{A}_2(0) \rangle = \int \sigma_1 \sigma_2 \frac{\partial^2 \mathcal{P}(\mathcal{A}_2)}{\partial \sigma_1 \partial \sigma_2} d\sigma_1 d\sigma_2 - \langle \chi_2 \rangle^2 .$$

O caso plano é um pouco mais complicado, a função  $F_1(\sigma)$  escrita através de kernels matriciais pode ser encontrada em [73]. Já a covariância do caso plano, o que ficou conhecido como processo de  $\text{Airy}_1$ , foi obtido para essa geometria em [76,77], e mais tarde foi provado que esse processo tem a forma da covariância espacial para interfaces planas [78]. Entretanto, ao contrário do caso curvo, foi mostrado que  $\text{Airy}_1$  não é o processo limitante da difusão do maior autovalor de matrizes do GOE [81].

Em duas dimensões existem apenas resultados numéricos da forma das covariâncias espaciais para a classe KPZ. Na Fig. 2.13 apresentamos a forma dessas covariâncias espaciais para os casos plano e curvo.

A covariância temporal também distingue a curvatura. Para o caso plano, resultados numéricos levaram a conjectura de que  $C_t \sim t^{-\beta-d/z}$  seria válida para todas as classes e dimensões [82]. Já para o caso curvo a conjectura análoga foi feita em [83], onde foi proposto que  $C_t \sim t^{-\beta}$ . Como vai ser mostrado no capítulo 5, essas conjecturas realmente funcionam muito bem nas diferentes classes que consideramos. A Fig. 2.13 ilustra o acordo dessas conjecturas em sistemas KPZ, onde podemos também observar a forma da função de escala  $\Phi$ .

É interessante comentar a relação entre a covariância temporal e o *aging* de séries “temporais” de ruídos. Para entender o que significa *aging*, vamos considerar uma série  $X(s)$ , onde estamos intencionalmente evitando usar o tempo, pois, como visto na subseção 2.4.1, o que é tempo em um movimento browniano pode se tornar espaço em uma superfície. Calculando  $C = \langle X(s+\rho)X(s) \rangle$ , se  $C$  depende apenas de  $\rho$ ,  $X(s)$  é uma série estacionária, caso contrário, se  $C$  também depende de  $s$ , temos uma série não estacionária, ou *aging* (envelhecendo). Da evolução de uma interface podemos extrair a série  $h(x)$  com  $t$  fixo, que, como podemos ver nas Fig. 2.13(a) e 2.13(b), é estacionário já que a covariância não depende de  $x$ , mas apenas de  $r = \rho$ . Como a série temporal de um movimento browniano é equivalente a uma superfície unidimensional da classe EW/KPZ no regime de saturação da rugosidade, fica evidente que essa série também é estacionária. Por sua vez, a covariância temporal é diferente, já que fixando  $x$  e extraíndo a série  $h(t)$  obtemos uma covariância que depende de um  $t_0$ , como vemos na reescala das Fig. 2.13(c) e 2.13(d). Isso significa que as superfícies no regime de crescimento apresentam um *aging*. No regime de saturação, a rugosidade para de crescer e a covariância temporal se torna independente de  $t_0$ , por isso frequentemente dizemos que superfícies nesse regime estão no estado estacionário. Uma discussão mais geral sobre *aging* em fenômenos fora do equilíbrio pode ser encontrada na referência [85].

Com base na discussão dessa subseção e da anterior, vamos nos referir a estatística obtida na subclasse plana como  $\text{GOE-Airy}_1-C_t \sim t^{-1}$  e na subclasse curva como  $\text{GUE-Airy}_2-C_t \sim t^{-\beta}$ .

### 2.6.3 Distribuição de rugosidade e extremos locais

A nossa discussão sobre universalidade além dos expoentes de escala foi até aqui mais voltada para o regime de crescimento da rugosidade. Já as distribuições locais que vamos discutir nesta subseção estão relacionadas com as flutuações estacionárias das superfícies. Essas distribuições são definidas através de medidas em janelas, como brevemente discutido na subseção 2.4.1. Dada uma quantidade de interesse  $X$ , definimos a distribuição local dessa

## 2.6 Universalidade além dos expoentes de escala



grandeza dividindo o sistema em janelas de tamanho  $l$ . Assim, em cada uma dessas janelas, essa variável assumirá um valor  $X_i$ . Estudando as flutuações dessa grandeza nessas janelas obtemos a distribuição  $P_l(X)$ , onde deixamos evidente que essa distribuição deverá depender do tamanho da janela. Então, a distribuição de rugosidade quadrática local é simplesmente a distribuição da flutuação de  $w_i^2 \equiv \bar{h}^2 - \bar{h}^2$ , onde essas barras representam médias realizadas dentro da janela indexada por  $i$ . Já as de extremos relativos são obtidas tomando a maior altura dentro da janela em relação à média,  $M_i = h_{max} - \bar{h}$ , ou a menor altura,  $m_i = h_{min} - \bar{h}$ , que produzem as distribuições de máximos locais e mínimos locais, respectivamente.

A primeira vista, essas distribuições podem parecer pouco relevantes, já que, por exemplo, o segundo cumulante da distribuição de rugosidades quadráticas é basicamente a “rugosidade da rugosidade”. Além disso, a análise dos expoentes, distribuições de altura e covariâncias deve ser suficiente para relacionar a dinâmica de uma interface com uma das classe de universalidade. No entanto, medidas experimentais são frequentemente difíceis de se interpretar, por isso normalmente é necessário procurar uma coerência entre diversas medidas distintas para se classificar precisamente um dado fenômeno. Por isso, trabalhos recentes reportando interessantes realizações experimentais da classe KPZ [8,20,21,23,86] e outras [87] em  $d = 2$  tem feito uso de ambas as distribuições (de rugosidade e extremos) para fortalecer suas conclusões. Nesse sentido é importante obter diversas propriedades universais para cada classe afim de aumentar as possibilidades de comparação.

A distribuição de extremos tem uma aplicação muito interessante no contexto de catástrofes, porque ela está relacionada a eventos raros que normalmente são desconsiderados, e que podem resultar em consequências drásticas. Por exemplo, analisando a distribuição de alturas extremas de um rio é possível calcular um número esperado de enchentes por ano, ou fazer o caminho contrário e canalizar o córrego com vazão suficiente tal que seja esperada uma enchente por década ou algo assim. Para variáveis descorrelacionadas a forma da distribuição de extremos depende apenas da cauda da distribuição em questão, sendo uma distribuição de Weibull se a cauda decair com uma lei de potência até um corte, uma distribuição de Fréchet quando ela decai com lei de potência sem limite superior, ou uma distribuição de Gumbel se a cauda decai mais rápido que uma lei de potência. Uma discussão mais detalhada sobre distribuições de extremos em variáveis descorrelacionadas pode ser encontrada em [88]. No contexto de dinâmica de interfaces essa distribuição tem sido razoavelmente explorada para diversas classes de universalidade [89–95]. Já a distribuição de rugosidade começou a ser estudada após os trabalhos [96–98], onde foi demonstrado que a distribuição de rugosidade também é universal. Desde então, ela tem sido explorada em diversos outros trabalhos [99–101].

Para a classe EW em  $d = 1$ , o cálculo analítico da distribuição de rugosidade quadrática com condições de contorno periódicas foi obtida em [96,102]<sup>15</sup>. Contudo, esse resultado para a rugosidade global não se aplica à flutuação da rugosidade em janelas, pois nessas janelas não haverá condições de contorno periódicas mesmo se o sistema for globalmente periódico. Alguns anos depois a distribuição de rugosidades seria calculada em [103] para condições de contorno abertas. Nessa referência, os autores calculam a distribuição de rugosidade para perfis de distribuição Gaussiana com diferentes  $\alpha$ 's, o que se aplica naturalmente às classes EW e MH. Em uma dimensão a classe KPZ acaba sendo contemplada, dado que no estado estacionário ela possui as mesmas flutuações que a classe EW.

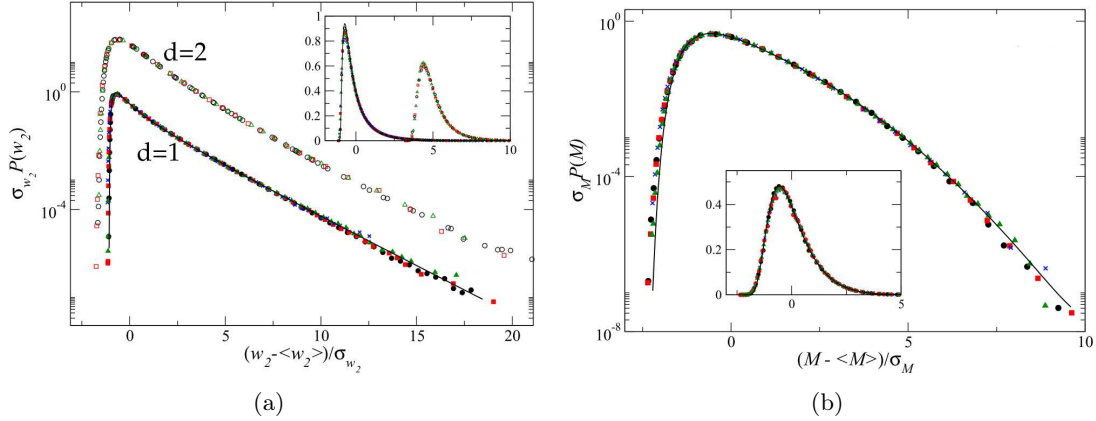
Por sua vez, a distribuição de extremos foi obtida para EW/KPZ em  $d = 1$  com condições de contorno periódicas por Majumdar e Comtet em [91]. Essas distribuições foram

<sup>15</sup>Essa condição de contorno considera que em um sistema de tamanho  $L$  temos  $h(x) = h(x + L)$ . Qualitativamente é como se o sistema fosse um anel de perímetro  $L$  (em  $d = 1$ ). Essa condição de contorno é muito comum em simulações por reduzir os efeitos de tamanho finito.

## 2.7 Universalidade além dos expoentes de escala



comparadas com experimentos de cristal líquido e simulações [22], onde uma concordância muito boa foi verificada. É curioso notar que, ao contrário da distribuição de rugosidade, a distribuição de extremos obtida com condições de contorno periódicas concorda bem com resultados das distribuições de extremos locais. A razão disso é que enquanto na distribuição de rugosidade todos os sítios dentro da janela tem igual importância, na distribuição de extremos temos um único sítio mais relevante que os demais, e por isso provavelmente a condição de contorno seja menos relevante.



**Figura 2.14:** (a) Distribuições de rugosidade quadrática local de diferentes modelos da classe KPZ em uma e duas dimensões (símbolos). Em uma dimensão, comparamos com a curva teórica obtida por Antal et al. (linha sólida). (b) Comparação da distribuição de máximos locais obtida por Majumdar e Comtet (linha sólida) com resultados de modelos da classe KPZ em uma dimensão. Retiradas da Ref. [104].

A título de ilustração, apresentamos na Fig. 2.14 a forma dessas distribuições para a classe KPZ em uma e duas dimensões.

## 2.7 Geometria versus condição inicial

Como vimos nas subseções passadas, é bem estabelecido na literatura que existe uma subdivisão na classe KPZ relacionada à curvatura das interfaces, onde a HD e a covariância espacial e temporal dependem da geometria da interface, enquanto os expoentes de escala são os mesmos. Pensando qualitativamente nas principais diferenças entre um crescimento curvo e um plano notamos duas características marcantes do caso curvo: (i) obviamente, a presença de uma curvatura global; (ii) uma zona ativa que cresce linearmente no tempo, pois  $L \sim 2\pi\langle R \rangle \sim t$ . Apesar de (i) parecer mais fundamental, na referência [16] foi mostrado numericamente que a curvatura global é irrelevante, ou seja, um crescimento globalmente plano com uma zona ativa que cresce lateralmente possui as mesmas características que um sistema genuinamente curvo. Na verdade, os gráficos apresentados nas Fig. 2.12 e 2.13 são resultados dessas simulações, sendo  $\omega$  a velocidade de crescimento lateral<sup>16</sup>, onde pode se ver o excelente acordo com os resultados esperados para geometria curva. Embora esses resultados pareçam impressionantes a primeira vista, eles são, de certa forma, naturais. O regime de interesse envolve agregados grandes, e como estamos falando de crescimentos locais, as partículas interagem diretamente apenas com uma vizinhança pequena em torno de si, onde

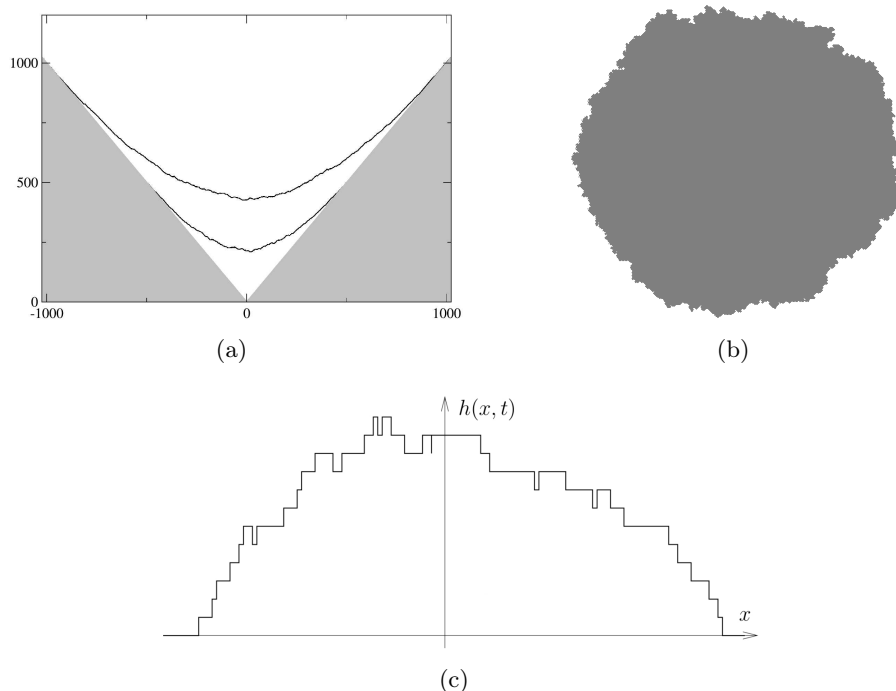
<sup>16</sup>Vamos definir precisamente o algoritmo dessas simulações no próximo capítulo.



## 2.7 Universalidade além dos expoentes de escala



a curvatura global produz uma componente na curvatura local que escala com  $1/R$ . Sendo assim, é previsível que para raios grandes as interações não sintam efeitos dessa curvatura global. Dessa forma, sobra apenas o crescimento correlacionado da zona ativa, onde essa correlação se dá pelo fato de que, a medida que o agregado cresce, mais partículas cabem em um mesmo intervalo angular. No entanto, essas partículas “extras” devem se acomodar entre a posição angular das partículas anteriores, fazendo com que os “novos sítios” sejam fortemente correlacionados com os anteriores.



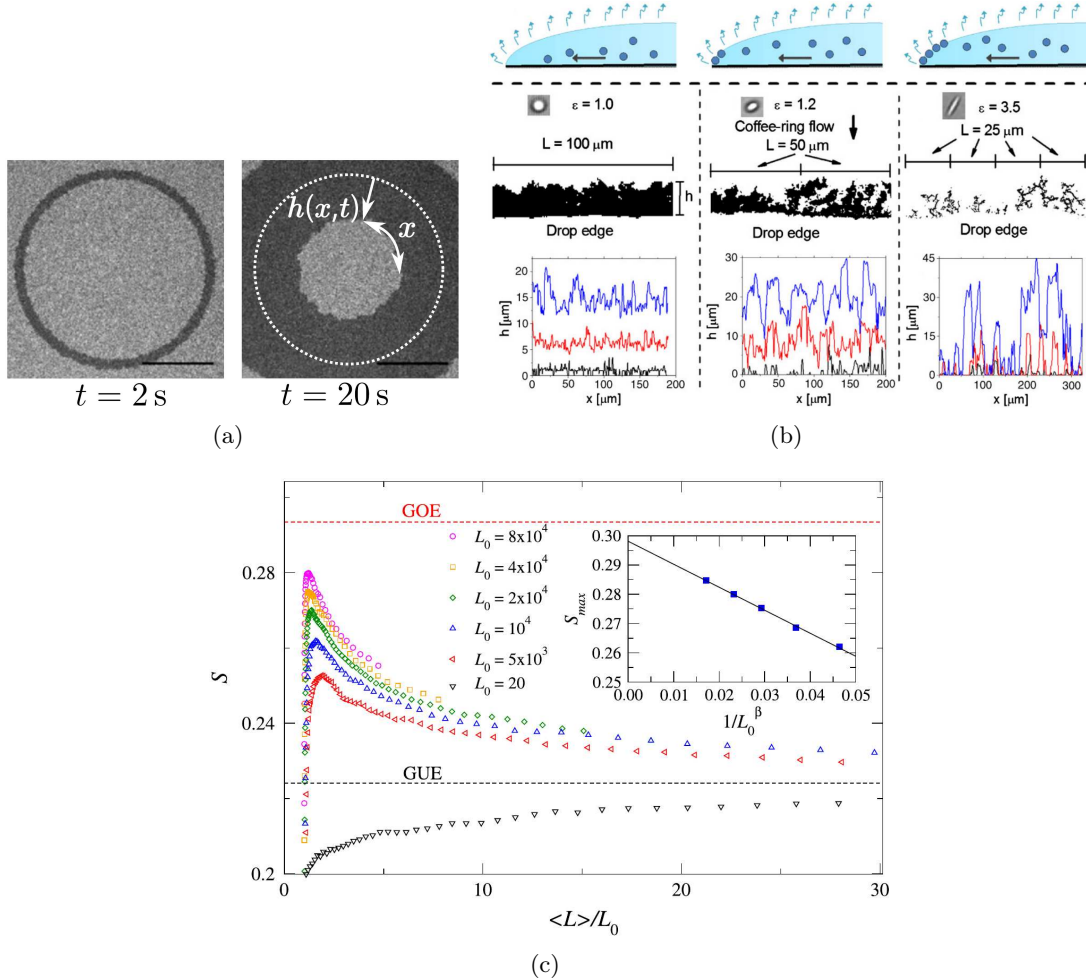
**Figura 2.15:** Exemplos de interfaces curvas obtidas em modelos discretos. (a) modelo RSOS crescido em uma cunha nos tempos  $t = 512$  (abaixo) e  $t = 1024$  (acima), extraída de [15]. Modelos de Eden (b) e PNG (c) (extraída de [106]) crescidos de uma semente no centro da rede.

Quando discutimos sobre a subdivisão das classes de universalidade, talvez seja mais apropriado se referir à condição inicial (CI) ao invés da geometria. É evidente que existe um vínculo entre esses dois termos, já que a condição inicial pode induzir uma curvatura na interface. O exemplo mais evidente disso talvez seja o crescimento em uma condição inicial em forma de cunha. Basicamente, modelos com restrição de diferença de alturas, como o RSOS e SS (serão definidos no próximo capítulo), crescidos em um substrato com a forma da função  $f(x) = |x|$  (ver Fig. 2.15(a)) resultam em interfaces visivelmente curvas em  $x = 0$ , onde a estatística é inclusive GUE. Outro exemplo de condição inicial que produz curvatura são crescimentos a partir de uma semente. Modelos como o PNG [63] ou o Eden (definido no próximo capítulo), quando crescidos a partir de um único sítio no centro de uma rede, também produzem interfaces com curvatura global, ver Fig. 2.15. Note que em todos esses casos o tamanho da superfície cresce linearmente com o tempo. Por outro lado, para todos os modelos mencionados até agora, se o crescimento partir de uma linha reta infinita, a interface produzida é plana com estatística  $\text{GOE-Airy}_1 - C_t \sim t^{-1}$ . No entanto, como dito no parágrafo anterior, mesmo interfaces planas podem ter estatística  $\text{GUE-Airy}_2 - C_t \sim t^{-\beta}$ , contanto que o tamanho lateral do sistema cresça linearmente no tempo. Assim, é preferível o

## 2.7 Universalidade além dos expoentes de escala



termo *condição inicial*<sup>17</sup>, que usamos referindo simultaneamente a forma, ao tamanho inicial e a dinâmica subsequente do substrato. Ao longo dessa tese, por praticidade cometemos abusos de linguagem e usamos os termos CI “plano” e CI “curvo” para nos referir as condições que produzem estatística  $\text{GOE-Airy}_1-C_t \sim t^{-1}$  e  $\text{GUE-Airy}_2-C_t \sim t^{-\beta}$ , respectivamente.



**Figura 2.16:** (a) Ilustração da configuração onde é obtida a interface curva que cresce para dentro nos experimentos com cristais líquidos [18]. A barra preta tem o comprimento de um milímetro. (b) Crescimento de um depósito formado na borda da evaporação de gotas com suspensões coloidais [17]. Em cima está uma ilustração de como as partículas fluem para a borda da gota a medida que a mesma evapora. No meio e embaixo temos três colunas separando as diferentes formas das partículas, na coluna do meio estão as partículas que produzem interfaces KPZ. (c) *Skewness* obtida em diferentes tamanhos iniciais nas simulações com interfaces planas que inflam lateralmente. Na Ref. [16] pode ser visto que a curva da *Kurtosis* tem um comportamento parecido. O painel interno mostra como a extrapolação da altura do pico no *crossover* em função de  $1/L_0^\beta$  é próxima da *Skewness* da distribuição GOE.

A necessidade dessa mudança de termo ficou ainda mais evidente após resultados experimentais recentes [18], onde foi mostrado que uma interface curva de raio inicial grande, e que cresce para dentro (o raio diminui no tempo), ver a Fig. 2.16(a), possui estatística plana.

<sup>17</sup>Esse termo pode parecer confuso por ele incluir a dinâmica posterior do substrato. Talvez fique mais intuitivo se ressaltarmos que o tamanho  $L = L_0 + \omega t^\gamma$  é fixado a priori.

## 2.7 Universalidade além dos expoentes de escala



Isso contradiz resultados anteriores [17], onde foi mostrado que o depósito formado na borda de gotas (com partículas coloidais suspensas) em evaporação, que também produz interfaces curvas com raio inicialmente grande e que crescem para dentro, possui estatística curva se as partículas forem levemente anisotrópicas, Fig. 2.16(b). Assim, temos uma controvérsia entre resultados experimentais. Se pensamos apenas na curvatura, os resultados obtidos no cristal líquido podem causar um certo espanto. No entanto, voltando às simulações de sistemas planos que inflam lateralmente, já havia sido mostrado em [16] que se o tamanho inicial for muito grande, a HD sofre um *crossover* da distribuição GOE (plana) para GUE (curva), Fig. 2.16(c). Dessa forma, desconsiderando a geometria e analisando apenas a condição inicial, os resultados no cristal líquido deixam de ser surpreendentes e se tornam, na verdade, muito esperados.

Motivados por essa controvérsia, revisitamos as simulações da classe KPZ em interfaces planas com variação do tamanho da interface. No capítulo 4 vamos apresentar os resultados de simulações em domínios decrescentes, tentando elucidar essa controvérsia nos resultados experimentais. Além disso, na referência [16] foi estudado apenas o caso de lado crescente com  $L = L_0 + \omega t$ , e  $\omega > 0$ . Por isso, vamos explorar também o caso mais geral onde  $L = L_0 + \omega t^\gamma$ , com  $\omega$  positivo e negativo, com vários valores de  $\gamma$  no intervalo  $0 < \gamma \leq 1,5$ . Isso no intuito de verificar como a competição entre o crescimento do comprimento de correlação ( $\xi \sim t^{1/z}$ ) e do tamanho do sistema afetam a estatística da superfície.

Observando a importância da condição inicial na classe KPZ, é natural se perguntar o que acontece nas demais classes de universalidade. Apesar de ser uma pergunta simples, ela ainda não foi abordada. A ausência de trabalhos nesse sentido deve ser consequência da escassez de modelos que produzem interfaces curvas que não pertençam à classe KPZ. De fato, o único modelo discreto de crescimento desenhado para produzir superfícies curvas pertence à classe KPZ, que é o modelo clássico proposto por Eden [84]. Mesmo assim, a princípio, não há nada que impeça a existência de crescimentos curvos dominados por efeitos não contidos na equação KPZ. A possibilidade de simular sistemas planos que inflam lateralmente no tempo para obter superfícies da subclasse curva, nos permite simular toda a gama de modelos bem estabelecidos de cada classe. Dessa forma, podemos investigar essa subdivisão “geométrica” nas diferentes classes. Isso vai ser explorado no capítulo 5.

Como diversas propriedades das superfícies KPZ mudam de acordo com a CI, podemos nos perguntar se essa subdivisão também afeta as distribuições estacionárias de rugosidade e extremos. O algoritmo para crescimento lateral nos permite fixar o modelo e variar apenas a CI, tornando possível verificar com precisão se a subdivisão produz algum efeito nessas distribuições. No capítulo 6 vamos apresentar os nossos resultados sobre esse assunto.

## Capítulo 3

# Modelos e algoritmos

Neste capítulo vamos definir os diversos modelos que utilizamos para explorar as diferentes classes de universalidade. Simulações que tentam descrever e imitar precisamente um sistema real, normalmente envolvem algoritmos relativamente complexos. No entanto, os modelos aqui apresentados são, na maioria das vezes, muito simples, por isso são frequentemente chamados de “*toy models*”. A simplicidade deles nos permite realizar simulações em sistemas grandes por longos intervalos de tempo. Sendo assim, se o objetivo do estudo não for modelar um sistema real específico, e sim analisar as propriedades gerais das classes de universalidade, esses modelos são uma ótima escolha. Será apresentado também o algoritmo utilizado para se produzir superfícies com estatística de crescimentos com curvatura global usando interfaces planas.

Na simulação de modelos discretos consideramos um reticulado hipercúbico de espaçamento de rede  $a$ , onde a superfície  $d$ -dimensional de lado  $L$  se propaga em um espaço com  $d+1$  dimensões. Normalmente tomamos uma condição inicial lisa no fundo dessa rede ( $h(\vec{x},0) = 0$ ) como substrato. Dessa forma,  $\vec{x}$  é um vetor  $d$ -dimensional restrito ao substrato, e o valor de  $h$  representa a coordenada na direção perpendicular à interface, que é a direção de crescimento. Sobre esse substrato são depositadas partículas de  $d+1$  dimensões e lado  $a$ , alinhadas a rede hipercúbica, que vêm de  $h \rightarrow \infty$  na direção a interface se deslocando em uma trajetória linear e perpendicular ao substrato ( $\vec{x}$  fixo). Dessa forma, para simular o fluxo estocástico de  $F$  partículas por unidade de área e tempo, a cada deposição sorteamos uma posição  $\vec{x}$  na qual a partícula partirá em direção ao substrato. Sem nenhuma perda de generalidade podemos tomar  $a = 1$  e  $F = 1$ . Assim, por exemplo, no caso unidimensional as alturas podem ser representadas pelo vetor  $h_i$  com  $i \in \{1, \dots, L\}$ , e a cada  $L$  deposições se passa uma unidade de tempo. Para diminuir os efeitos de tamanho finito consideramos condições de contorno periódicas, onde, ainda no exemplo unidimensional, o vizinho direito do sítio  $i = L$  é o sítio  $i = 1$ .

### 3.1 Modelos discretos da classe KPZ

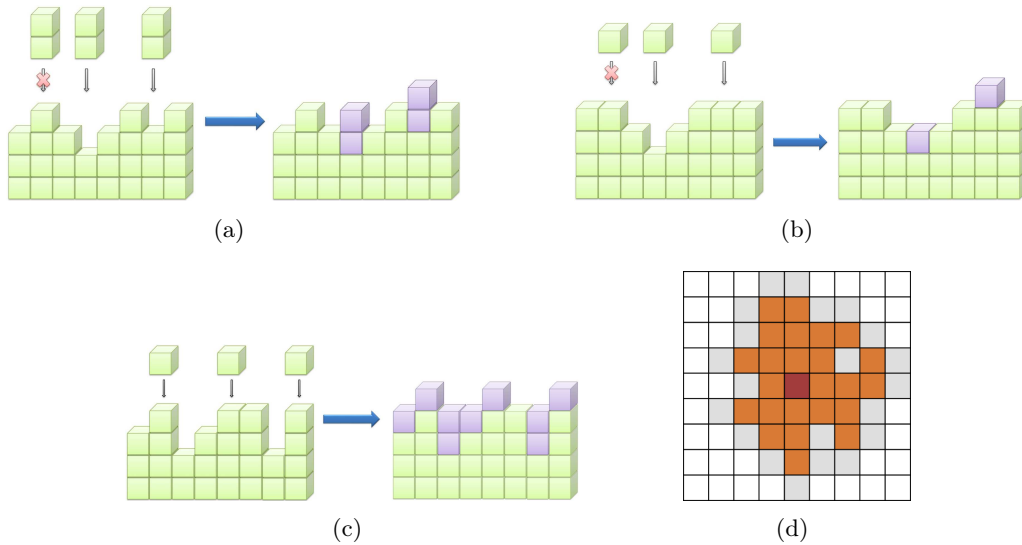
Para ser um candidato a essa classe, o modelo deve ter agregação de partículas de forma não-conservativa. Isso acontece se a deposição de uma partícula produzir um acréscimo de altura maior que o parâmetro de rede  $a$ , ou se existir recusa de deposição de partículas, o que produz um excesso de velocidade positivo ou negativo, respectivamente. Efetivamente, se a média dos acréscimos na altura média causado por um evento de deposição for diferente de  $1/L$ , considerando partículas de tamanho unitário, o crescimento é não-conservativo. Se o

### 3.1 Modelos discretos da classe KPZ



acréscimo for maior que  $1/L$ , temos excesso de velocidade positivo e, caso contrário, o excesso de velocidade é negativo (quando o acréscimo é menor que  $1/L$ ).

O primeiro modelo que vamos definir é chamado de *Single-Step* (SS), sua definição pode ser encontrada em [107]. Esse modelo é especialmente interessante por possuir uma ligação direta, ou seja um mapeamento, em outros modelos fora do contexto de interfaces, como o modelo de Ising e o *Totally asymmetric simple exclusion process* (TASEP) [108]. O algoritmo desse modelo produz interfaces com diferenças de altura sempre iguais a um, ou seja,  $|\Delta h_{i,\{j\}}| = 1 \forall i$ , onde  $\{j\}$  representa o conjunto de todos os sítios  $j$ 's primeiros vizinhos de  $i$  e  $\Delta h_{i,j} \equiv h_i - h_j$ . Nesse caso começa-se com uma condição inicial tipo “serra”, com  $h_i = 1$  se  $i$  for par ou  $h_i = 0$  caso contrário, ou vice-versa. Note que o número de sítios precisa necessariamente ser par se houver condições de contorno periódicas. A evolução da superfície é feita sorteando-se aleatoriamente um sítio  $i$  do substrato, onde uma partícula de altura dois (um dímero vertical) tenta se agregar, sendo recusada a tentativa se ela produzir uma diferença de alturas diferente de um. Na prática, a deposição de uma partícula só é aceita se o sítio  $i$  for um mínimo local. Independentemente de o dímero ser aceito ou não, de acordo com a definição do fluxo  $F$ , a cada tentativa de deposição o tempo recebe um acréscimo de  $1/(FL^d)$ , onde  $F = 1$  nas nossas simulações. A Fig. 3.1(a) ilustra essa regra de deposição. Note que a recusa de partículas produz um “excesso de velocidade” negativo no modelo. Portanto, o coeficiente  $\lambda$  da Eq. KPZ deve ser negativo para o SS.



**Figura 3.1:** Ilustrações de modelos da classe KPZ: (a) SS, (b) RSOS e (c) Etching. (d) Modelo de Eden, onde o sítio vermelho escuro é a semente, os sítios laranjas representam partículas do agregado e os cinzas são sítios da periferia.

Também com excesso de velocidade negativo temos o modelo *restricted solid-on-solid* (RSOS), proposto em [109]. Nesse modelo fixa-se um parâmetro  $m$  tal que  $|\Delta h_{i,\{j\}}| \leq m \forall i$ . Assim, tenta-se a deposição de uma partícula em um sítio  $i$  sorteado aleatoriamente, caso o resultado da deposição produza  $|\Delta h_{i,\{j\}}| > m$  para um ou mais dos vizinhos  $\{j\}$ , a partícula é recusada, ver Fig. 3.1(b)

Outro modelo que utilizamos extensivamente foi o modelo de Etching, proposto em [110]. Como o próprio nome diz, esse modelo foi inspirado em processos de erosão, mas estudaremos aqui o modelo com a regra (invertida) para crescimento. Ela consiste em sortear aleatoriamente um sítio  $i$  e para cada um de seus vizinhos fazer  $h_j = \max(h_j, h_i)$  e, em

### 3.3 Modelos discretos da classe VLDS



seguida,  $h_i = h_i + 1$ . A regra de deposição desse modelo em uma dimensão está ilustrada na Fig. 3.1(c). Parecido com o modelo de Etching, também utilizamos eventualmente o modelo de deposição balística, onde o sítio sorteado  $i$  é atualizado via  $h_i = \max(h_j, h_i + 1)$ .

Para finalizar essa seção vamos definir o modelo de Eden, proposto em [84]. Esse modelo foi inicialmente concebido para tentar simular o crescimento de uma colônia de células. Dentre as diversas variações encontradas na literatura, utilizamos os algoritmos conhecidos como Eden *A* e Eden *B*. A condição inicial desse modelo é uma única partícula (semente) no centro de uma rede quadrada muito grande. Os quatro primeiros vizinhos dessa semente fazem parte do que chamamos de periferia. Na versão *A* desse modelo, o agregado cresce sorteando um dos sítios dessa periferia e adicionando uma partícula a ele, e os vizinhos não ocupados desse novo sítio passam a fazer parte da periferia. Na versão *B*, um sítio do agregado que possua pelo menos um vizinho vazio é sorteado, e, em seguida, um de seus vizinhos não ocupados é sorteado com igual probabilidade onde é acrescentada uma partícula. A cada agregação atualizamos o tempo através do incremento  $\Delta t = 1/N_p$ , onde  $N_p$  é o número de sítios da periferia. Por causa da anisotropia da rede quadrada, o agregado produzido também é anisotrópico, crescendo mais rápido nas direções da rede. Uma consequência dessa anisotropia são parâmetros não universais  $v_\infty$  e  $\Gamma$  que variam angularmente. No Eden *A*, nós minimizamos esse problema utilizando o esquema proposto em [111]. Para isso, basta fazer com que o crescimento em um sítio sorteado da periferia seja aceito com probabilidade  $p = (n_i/4)^\kappa$ , onde  $\kappa = 1,705^1$  e  $n_i$  é o número de vizinhos ocupados do sítio sorteado  $i$ .

### 3.2 Modelos discretos da classe EW

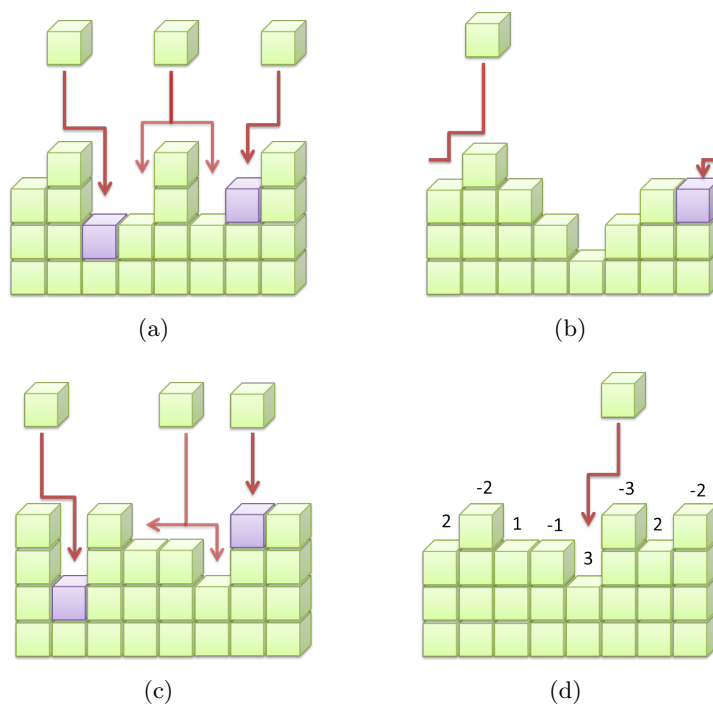
O modelo mais emblemático dessa classe é o modelo de Family [112]. Nele, a partícula depositada (aleatoriamente) em um sítio  $i$  permanece nesse sítio se  $h_i$  for a menor altura entre seus vizinhos. Caso contrário, a partícula difunde para o sítio  $j$  vizinho de  $i$  com menor altura. Quando mais que um sítio possuir a altura mínima da vizinhança, um sorteio é realizado para decidir em qual sítio a partícula agregará. A Fig. 3.2(a) ilustra a regra desse modelo.

Outro modelo que pertence à classe EW é uma generalização do modelo SS. Esse modelo consiste em definir uma probabilidade de deposição  $p$  e uma probabilidade de evaporação  $q = (1 - p)$ , onde essa evaporação só pode remover um dímero de um *máximo* local. O fluxo continua sendo de uma tentativa de atualização por sítio por unidade de tempo, e a condição inicial continua sendo tipo “serra”. Se  $p \neq 1/2$ , o resultado é uma superfície KPZ, sendo que quando  $p < 1/2$  a superfície evolui na direção negativa do eixo  $h$ . A morfologia produzida por  $p = 1/2 - \delta$  é equivalente a reflexão  $h \rightarrow h' = -h$  da superfície obtida com  $p = 1/2 + \delta$ . Sendo assim, como a assimetria da HD nessa classe é resultado do termo  $\lambda(\nabla h)^2$ , fica evidente que  $\lambda$  troca de sinal quando  $p$  passa por meio, o que significa que  $\lambda = 0$  quando  $p = 1/2$ , resultando numa interface EW. Nesse caso, temos evaporação a mesma taxa que a deposição, por isso a interface começa a enrugar em torno da posição inicial, mantendo  $\langle h \rangle = 1/2$ , ou seja, não há crescimento. Note que a dinâmica se torna reversível, por isso podemos dizer que o sistema está próximo do equilíbrio.

<sup>1</sup>Utilizamos um valor um pouco além do extremo do intervalo  $1,72 \pm 0,01$  estimado em [111]. Isso porque o valor que utilizamos removeu com mais eficiência a anisotropia nos agregados que consideramos. Para escolher esse parâmetro fizemos a média do resultado de diversos agregados e olhamos para o raio médio amostral em função do ângulo, o  $\kappa = 1,705$  produziu um raio médio mais constante.

### 3.3 Modelos discretos da classe VLDS

Um dos modelos mais utilizados na classe VLDS é uma modificação do RSOS, conhecido como *conserved* RSOS (CRSOS) [113]. Nesse modelo, assim como no RSOS, definimos um valor máximo  $m$  para as variações de alturas, tal que  $|\Delta h_{i,\{j\}}| \leq m$ . Se a deposição de uma partícula no sítio  $i$  produz uma variação maior que  $m$ , ela não se agrega nesta posição. Todavia, ao contrário do RSOS, onde essa partícula seria descartada, no CRSOS ela difunde para o sítio mais próximo onde a agregação não viola a restrição de alturas. Na Fig. 3.2(b) apresentamos uma ilustração dessa regra de crescimento.



**Figura 3.2:** (a) ilustração do modelo de Family. (b) Modelo CRSOS, aproveitando pra ilustrar a condição de contorno periódica. (c) e (d) são os modelos DT e LCM respectivamente.

Outro modelo muito utilizado dessa classe em uma dimensão é o definido por Das Sarma e Tamborenea (DT) [116]. Nesse modelo, uma partícula recém depositada num sítio  $i$  se agrega permanentemente ali se ela possuir ao menos um vizinho lateral, ou seja, se  $\Delta h_{i,j} \leq 0$  para algum vizinho  $j$ . Caso contrário, ela se desloca com igual probabilidade para qualquer sítio primeiro vizinho, no qual ela tenha pelo menos um vizinho lateral, ver Fig. 3.2(c), se esse sítio não existir ela permanece em  $i$ . Esse modelo sofre de fortes correções de escala e por isso é conveniente utilizá-lo com redução de ruído [114,115]. Isso consiste em só acrescentar uma partícula em um determinado sítio após um número  $N$  de tentativas aceitas, isto é, só depois que o for selecionado para crescer  $N$  vezes que fazemos  $h_i \rightarrow h_i + 1$ . Nas simulações do capítulo 5, a escala desse modelo ficou consideravelmente melhor com  $N = 20$ .

Em duas dimensões, o modelo *lateral aggregation of diffusing particles* (LADP) pertence à classe VLDS [117]. Nesse modelo, definimos um parâmetro  $G$  que limita o comprimento de difusão das partículas. Assim que a partícula chega à superfície, ela pode difundir executando um passeio aleatório de, no máximo,  $G$  passos para colunas vizinhas até encontrar um vizinho lateral. Se ela não encontrar nenhuma posição com ao menos um vizinho lateral

### 3.5 Modelos discretos da classe MH



ao longo dessa caminhada, ela se fixa na sua posição final.

O quarto modelo que consideramos para a classe VLDS é o modelo de Clarke–Vvedensky (CV) [118]. Esse modelo se aproxima bastante da discussão feita na seção 2.2. Nele definimos uma taxa de *hopping*  $h = \nu_0 e^{-\Delta E/k_\beta T}$ , com  $\Delta E = E_s + nE_b$ , onde  $E_s$  é a energia de ativação da difusão em platôs,  $n$  é o número de vizinhos laterais de uma partícula e  $E_b$  pode ser visto como uma energia de ligação lateral. A evolução desse modelo ocorre seguindo o método de Monte Carlo cinético [119], onde em cada passo de tempo sorteamos qual evento deve acontecer de acordo com as taxas. As deposições acontecem com taxa  $Q_d = FA$ , onde  $A$  é a área da superfície. Partículas sem vizinhos laterais (os adátomos) saltam aleatoriamente para um de seus vizinhos com taxa  $Q_0 = \nu_0 e^{-E_s/k_\beta T}$ , e a difusão de partículas com  $n$  vizinhos acontece com taxa  $Q_n = \nu_0 e^{-(E_s+nE_b)/k_\beta T}$ . Antes de cada evento o tempo é atualizado acrescentando  $\Delta t = 1/(FA + \sum_{i=0}^{2d} n_i Q_i)$ , onde  $n_i$  é o número total de partículas com  $i$  vizinhos laterais<sup>2</sup>. É evidente que esse modelo é muito mais realista que os demais considerados até aqui, em razão disso a sua simulação fica restrita a janelas de tempo menores. Como estamos interessados em propriedades universais, nessa tese focamos em uma versão simplificada desse modelo, onde assumimos que  $e^{-(E_s+E_b)/k_\beta T} \ll e^{-E_s/k_\beta T}$ , e assim desconsideramos a difusão de partículas com vizinhos laterais. Para dar uma noção da ordem de grandeza envolvida, consideramos um ambiente de fácil difusão, com baixa energia de ligação e alta temperatura. Se usamos  $E_b = 0,5eV$  e  $T = 800K$ , a taxa de difusão das partículas com um vizinho se torna  $Q_1 = Q_0 \times 0,0007$ , que ilustra o quanto normalmente  $Q_1 \ll Q_0$ . Usando  $F = 1$  definimos diretamente  $Q_0$ , fazendo o modelo depender de um único parâmetro. Depois dessas simplificações, esse modelo fica parecido com o LADP, a diferença é que, ao invés da partícula executar diversos passos assim que ela chega na superfície, se fixando permanentemente após essa caminhada, no CV as difusões e as deposições acontecem de forma intercalada, onde todas as partículas sem vizinhos laterais e superiores podem se mover.

### 3.4 Modelos discretos da classe MH

Nesta classe, nós exploramos o modelo conhecido como *large curvature model* (LCM). Esse modelo consiste em sortear um sítio  $i$  e calcular o laplaciano discreto nele e em seus primeiros vizinhos, onde o laplaciano discreto é dado por  $\nabla^2 h_i = h_{i+1} + h_{i-1} - 2h_i$  em  $d = 1$ , ver um exemplo na Fig. 3.2(d). A partícula vai se agregar no sítio que possuir o maior laplaciano discreto entre o sorteado e seus primeiros vizinhos. Em caso de empate, sorteia-se um dos sítios. Se o sítio  $i$  fizer parte desse empate, a partícula não difunde e se agrega nele mesmo. Qualitativamente, nesse modelo as partículas tendem a se agregar no sítio de maior curvatura, fazendo jus ao seu nome.

Para finalizar a nossa discussão sobre modelos discretos, ressaltamos que os modelos das classes MH e VLDS exigem alguma cautela. Isso porque, como discutido na subseção 2.5.3, *crossovers* podem aparecer em tempos longos, como verificado na referência [120] por exemplo. Além disso, os modelos podem mudar de classe dependendo da dimensão do espaço, como acontece com o DT [115,121,122] e parece acontecer com CV e LADP (ver Sec. 5.3).

<sup>2</sup>Sendo mais formal,  $\Delta t = 1/(FA + \sum_{i=0}^{2d} n_i Q_i) \ln(1/u)$ , onde  $u$  é uma variável aleatória de distribuição uniforme entre (0,1]. Isso porque o intervalo entre eventos deve seguir uma distribuição de Poisson. Quando omitimos esse termo estamos considerando que o intervalo é dado pela media dessa distribuição, sendo  $\langle \ln(1/u) \rangle = 1$ .



## 3.5 Integração das equações

O modelo LCM sugere a ideia de usar a própria forma da equação de interesse como modelo de deposição. Assim, aqui é propício introduzir a definição da integração das equações de crescimento. Definindo essas equações estocásticas em um reticulado unidimensional, por exemplo, temos:

$$h_i(t + \Delta t) = h_i(t) + \Delta t \mathcal{L}[h_i(t)] + \sqrt{2D\Delta t} \zeta_i \quad (3.1)$$

onde  $\mathcal{L}$  é o operador diferencial discreto referente à equação em questão,  $\zeta$  pode ser qualquer variável aleatória que satisfaça as condições do ruído não-conservativo e que possua variância unitária. Duas escolhas comuns são a distribuição normal  $N(0,1)$  e a distribuição uniforme entre  $-1/2$  e  $1/2$  multiplicada por raiz de doze. Como a equação 3.1 estabelece, a altura na posição  $i$  em um instante posterior é resultado de uma atualização que envolve o resultado das derivadas discretas  $\mathcal{L}[h_i(t)]$  e a adição do ruído, com cada sítio recebendo um valor independente deste último.

Certo cuidado precisa ser tomado com a integração das equações. A principal causa dos problemas que podem aparecer são as definições de derivadas discretas, que não funcionam bem em funções que variam razoavelmente na ordem da discretização. Como consequência disso, diversos efeitos indesejados podem acontecer, como: os resultados dependerem da forma de discretização usada [123]; o aparecimento de instabilidades [124,125]; os parâmetros não-universais da superfície resultante não serem necessariamente aqueles utilizados na integração [126].

A título de ilustração, para a equação KPZ em uma dimensão, usando diferenças finitas de primeira ordem, as derivadas discretas podem ser escritas como:

$$\mathcal{L}[h_i(t)] = \nu(h_{i+1} + h_{i-1} - 2h_i) + \frac{\lambda}{8}(h_{i+1} - h_{i-1})^2 \quad , \quad (3.2)$$

onde continuamos considerando uma rede de espaçamento unitário. Como foi verificado em [126], o perfil produzido usando essa discretização não possui os mesmos parâmetros utilizados na integração. Essa diferença levou a proposição de uma nova discretização

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[h_i(t)] = & \nu(h_{i+1} + h_{i-1} - 2h_i) \\ & + \frac{\lambda}{6} [(h_{i+1} - h_i)^2 + (h_{i+1} - h_i)(h_i - h_{i-1}) + (h_i - h_{i-1})^2] \quad . \quad (3.3) \end{aligned}$$

Em [123], foi mostrado que essa discretização, mais simétrica, produz perfis com os mesmos parâmetros utilizados na integração. Essa discussão foi feita pra mostrar que, assim como ocorre em integrações numéricas em geral, existe uma liberdade na escolha das derivadas discretas e uma escolha apropriada pode levar a resultados mais precisos.

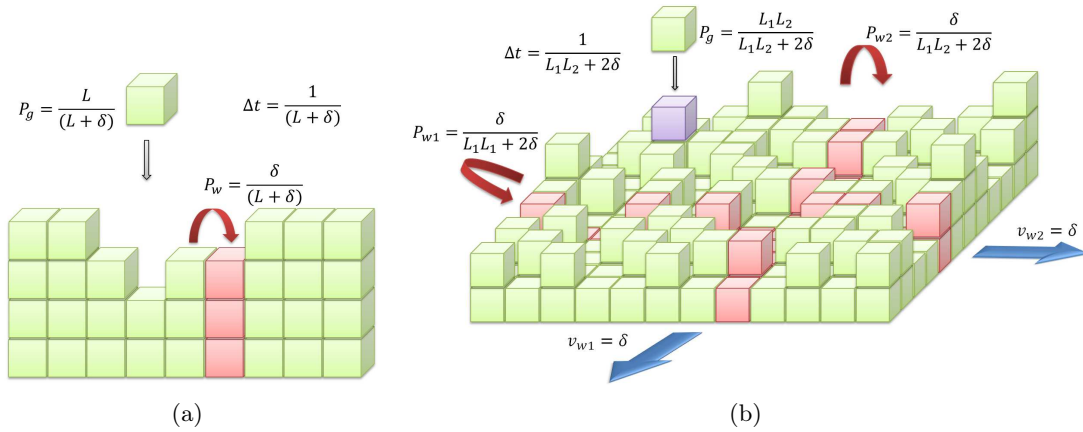
## 3.6 Algoritmo para simulação de interfaces com tamanho lateral variável

A ideia principal desse algoritmo foi desenvolvida nas referências [16,130]. O objetivo é realizar uma simulação onde o tamanho do sistema evolui de acordo com uma relação pré estabelecida  $L = L_0 + \omega t^\gamma$ . Em [16], consideramos que esse tamanho cresce com  $L(t) = L_0 + \omega t$ , isso porque em um agregado circular  $L(t) \approx 2\pi \langle R(t) \rangle$  onde  $\langle R(t) \rangle \sim v_\infty t$ . No entanto, no próximo capítulo vamos estudar sistemas que variam de forma mais geral, que crescem ou

### 3.6 Algoritmo para interfaces com tamanho lateral variável



decrecem de forma não linear. Para fazer o tamanho do sistema variar no tempo, alternamos entre eventos de deposição e eventos de duplicação/remoção de um sítio da superfície. Portanto, definimos uma probabilidade de deposição  $P_g = L/(L + \delta)$ , onde  $\delta = dL/dt$ , e de forma complementar uma probabilidade de duplicação/remoção  $P_w = \delta/(L + \delta)$ , onde essas variações de tamanho são realizadas em sítios escolhidos aleatoriamente. Essas probabilidades são definidas de modo que o número médio de deposições em uma unidade de tempo seja igual ao tamanho médio do sistema nesse intervalo, e que o sistema varie de tamanho com uma velocidade lateral  $\delta$ . A cada evento, o tempo é incrementado de  $\Delta t = 1/(L + \delta)$ . Na Fig. 3.3(a) apresentamos uma ilustração do algoritmo para o crescimento em uma dimensão. Os eventos de deposição podem seguir a regra de qualquer modelo definido até aqui, como será apresentado ao longo dos resultados desta tese, a variação de tamanho não muda o conjunto de expoentes de escala de um dado modelo, influenciando apenas na HD e nas correlações espaciais e temporais.



**Figura 3.3:** (a) Ilustração do algoritmo para produzir interfaces que crescem lateralmente em uma (a) e duas (b) dimensões.

Esse algoritmo pode ser facilmente generalizado para dimensões maiores, basta fazer com que cada direção ortogonal varie com uma velocidade  $\delta$ . Para isso, no caso crescente em duas dimensões por exemplo, ao invés de duplicarmos um único sítio, vamos duplicar uma coluna inteira ou linha da matriz que representa o sistema. Sendo assim, as probabilidades passam a ser  $P_g = L_1 L_2 / (L_1 L_2 + 2\delta)$ , onde  $L_1$  e  $L_2$  são o comprimento de cada lado. As duplicações acontecem com  $P_w = \delta / (L_1 L_2 + 2\delta)$  em cada direção, como ilustrado na Fig. 3.3(b). É importante ressaltar que o modelo SS especificamente demanda uma ligeira alteração nesse algoritmo, visto que ele não admite  $h_i - h_{i+1} = 0$ , por isso é necessário duplicar ou remover um par de sítios primeiros vizinhos (ou colunas e linhas, dependendo da dimensionalidade do espaço). Dessa forma, sorteando um sítio  $i$ ,  $h_{i+1} = h_{i-1}$  e  $h_{i+2} = h_i$ . Isso dobra a velocidade lateral, e por isso utilizamos  $\delta/2$  na definição das probabilidades para esse modelo. No caso decrescente, um cuidado adicional deve ser tomado, pois a remoção de colunas pode produzir diferenças de alturas maiores que as aceitas. Caso isso aconteça, é necessário sortear novos sítios até encontrarmos um no qual a remoção não quebre a restrição de alturas do modelo. Essa alteração deve ser feita nos modelos RSOS, CRSOS, SS e qualquer outro modelo que possua restrições nas diferenças de altura.

Finalmente, é importante destacar que nós não fomos os primeiros a estudar sistemas planos com variação temporal do tamanho lateral do sistema. Esse tipo de modelo foi primei-

### 3.6 Algoritmo para interfaces com tamanho lateral variável

---



ramente proposto em [127]. Posteriormente, variações foram exploradas analiticamente [128] e numericamente [129]. Esses trabalhos se concentram na escala da rugosidade, alguns deles motivados por uma certa controvérsia da época sobre a aplicabilidade da análise de escala da rugosidade, desenvolvida para interfaces planas, em interfaces curvas [131]. Um dos resultados interessantes de [127] foi a verificação de uma nova escala da rugosidade. Foi mostrado que se o sistema crescer mais devagar que o comprimento de correlação, que ocorre quando  $\gamma < 1/z$ , a interface se torna correlacionada, resultando em uma rugosidade que escala com  $W \sim L^\alpha \sim t^{\gamma\alpha}$ . O mesmo não ocorre quando  $\gamma > 1/z$ , onde a rugosidade segue a escala usual  $W \sim t^\beta$  do regime de crescimento. Esses resultados foram posteriormente obtidos analiticamente em [128]. Essa competição entre o comprimento de correlação e o tamanho do sistema desempenhará um papel fundamental no próximo capítulo. Ainda em [128], o autor usa os termos “domínios crescentes” e “substratos crescentes” para se referir a esses sistemas que inflam lateralmente no tempo, nesta tese também usaremos esses termos, ressaltando que o filme como um todo cresce lateralmente, e não apenas no substrato.

## Capítulo 4

# Propriedades universais e não universais em crescimentos KPZ em substratos de tamanho lateral variável no tempo

Neste capítulo, revisitamos as simulações de modelos da classe KPZ em domínios de tamanho lateral variável no tempo. Na Ref. [16] foi estudado apenas o caso linear ( $L = L_0 + \omega t$ ), com o intuito de imitar a evolução de sistemas circulares em  $d = 1$  ou esféricos em  $d = 2$ , cujos perímetros (ou área)  $\langle P \rangle$  das interfaces cresce com  $\langle P \rangle \sim \langle R \rangle^d \sim t^d$ . Aqui vamos generalizar isso estudando sistemas de tamanho  $L = L_0 + \omega t^\gamma$ , onde  $0 < \gamma \leq 1,5$  com  $\omega$  positivo e negativo. Primeiro vamos analisar o caso decrescente ( $\omega < 0$ ), posteriormente passaremos a investigação de domínios que crescem ( $\omega > 0$ ) com diferentes expoentes  $\gamma$ . Todos os resultados deste capítulo são para  $d = 1$

### 4.1 Substratos de tamanhos decrescentes

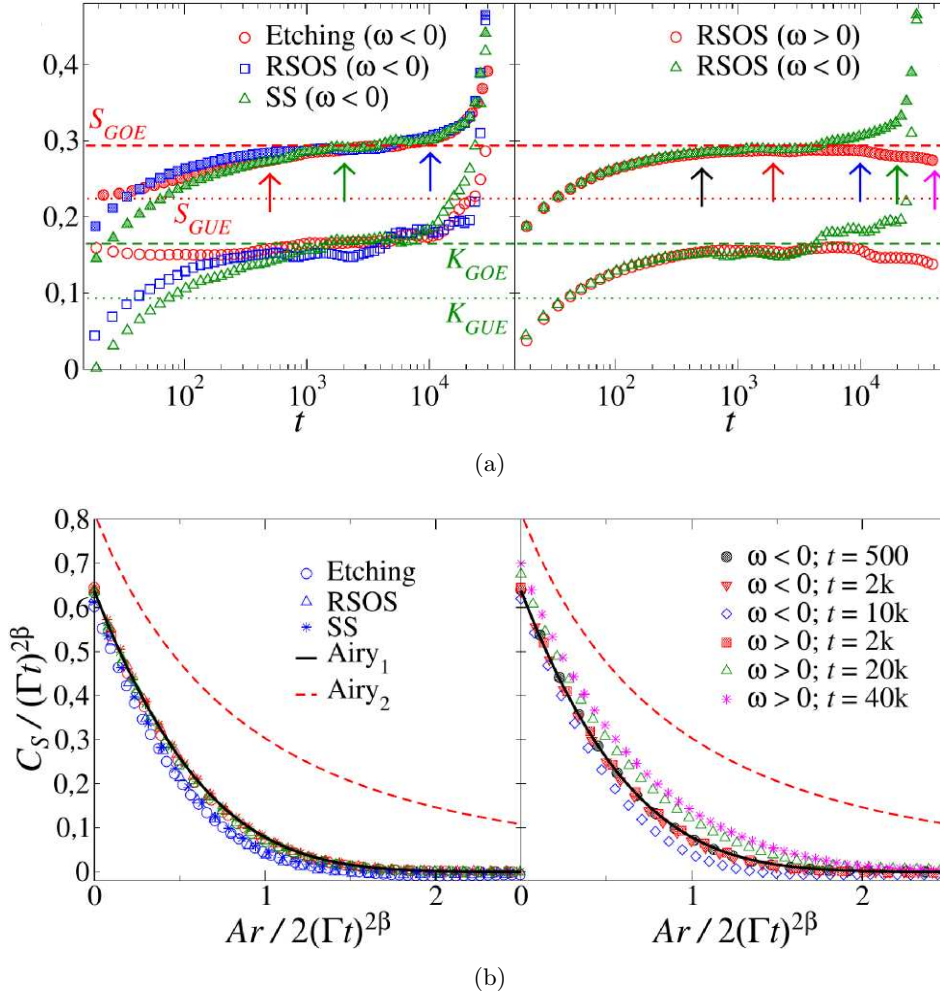
Nesta primeira seção, o objetivo principal é esclarecer a diferença entre as estatísticas encontradas em interfaces produzidas em experimentos com cristais líquidos [18] e deposição de partículas coloidais nas bordas de gotas [17]. Nessas montagens experimentais foram produzidos sistemas com curvatura global em interfaces de tamanho decrescente, isso porque, como pode ser visto nas Figs 2.16(a) e 2.16(b), o crescimento acontece no lado interno de um círculo, diminuindo o perímetro a medida que  $\langle h \rangle$  aumenta. Os resultados em suspensões coloidais mostraram o que se esperava, que esses sistemas com curvatura global possuem estatística GUE. Porém, resultados mais recentes em cristal líquido mostraram que sistemas curvos decrescentes possuem estatística GOE–Airy<sub>1</sub>. Motivados por essa diferença, utilizamos o algoritmo definido no capítulo passado para comparar domínios que crescem linearmente, que sabemos possuir estatística GUE–Airy<sub>2</sub>– $C_t \sim t^{-\beta}$ , com os que decrescem linearmente para verificar qual é o papel da dinâmica do substrato.

Começando pela HD, primeiro verificamos o comportamento da *Skewness* ( $S$ ) e da *Kurtosis* ( $K$ ). Na Fig. 4.1(a) apresentamos os valores dessas razões em domínios que crescem e decrescem, com tamanho inicial  $L_0 = 6 \times 10^5$  e  $|\omega| = 20$ . No painel da esquerda temos os resultados de diferentes modelos em domínios decrescentes. Nesse gráfico é bem evidente que  $S$  e  $K$  se mantêm nos valores da GOE por quase uma década, antes de começarem a

#### 4.1 Substratos de tamanho decrescente



aumentar rapidamente. Esse aumento final também foi observado em [18], ele provavelmente acontece porque o domínio decrescente se torna correlacionado em tempos longos. Mais especificamente, como a rugosidade de saturação escala com o tamanho do sistema, ela deve começar a decrescer quando o comprimento de correlação alcançar o tamanho do sistema, vamos analisar isso em detalhes mais afrente. No painel direito da Fig. 4.1(a) comparamos os substratos crescentes com os decrescentes. Nesse gráfico notamos que inicialmente os valores de  $S$  e  $K$  nas diferentes CI's são quase os mesmos, sendo independentes da evolução do tamanho do sistema, ambos os casos são iguais a sistemas de tamanho fixo, que não incluímos no gráfico para não atrapalhar a comparação. A partir de um tempo  $t \sim 5 \times 10^3$  as curvas começam a se separar, o valor de  $S$  e  $K$  no caso  $w > 0$  começam a decrescer na direção da GUE. Esse comportamento do domínio crescente já era esperado de [16] (Fig. 2.16(c)), onde foi verificado que o tamanho inicial muito grande produz um transiente inicial em GOE, enquanto em tempos longos esse tamanho se torna irrelevante e o sistema tende para GUE.



**Figura 4.1:** (a) Comparação de  $S$  e  $K$  dos modelos em substratos decrescentes ( $\omega = -20$ ) e crescentes ( $\omega = 20$ ). As linhas horizontais representam os valores de  $S$  (vermelhas) e  $K$  (verdes) da GOE (tracejadas) e GUE (pontilhadas). (b) Covariância espacial dos mesmos modelos com os mesmos parâmetros, medida nos tempos indicados pelas setas coloridas nos respectivos painéis de (a). A cor dos pontos em (b) corresponde a cor das setas em (a).

## 4.1 Substratos de tamanho decrescente

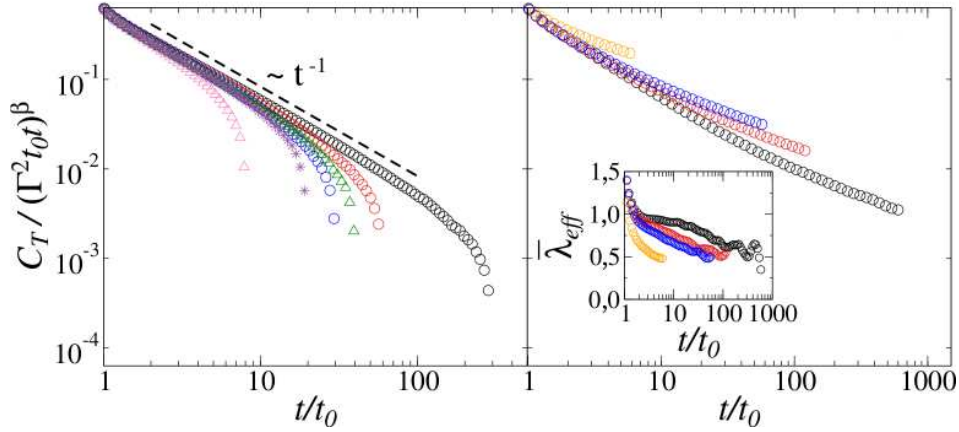


Para verificar com mais precisão a subclasse dos domínios decrescentes, analisamos também a covariância espacial e a temporal. No painel esquerdo da Fig. 4.1(b), mostramos as covariâncias espaciais dos diferentes modelos nos instantes de tempo marcados pelas setas coloridas do painel esquerdo da Fig. 4.1(a), onde as cores dos pontos da Fig. 4.1(b) é a mesma que a seta da Fig. 4.1(a) que marca o tempo da medida. Podemos notar que a covariância espacial concorda muito bem com a curva  $\text{Airy}_1$  nos tempos  $t = 500$  (seta vermelha) e  $t = 2000$  (seta verde), apresentando um desvio para baixo bem visível no tempo  $t = 10^4$  (seta azul), que é próximo da região de crescimento rápido de  $S$  e  $K$ . Para fazer uma comparação mais clara com os domínios que crescem, no painel direito da Fig. 4.1(b) mostramos apenas os resultados do modelo RSOS nos instantes marcados pelas setas do painel direito de Fig. 4.1(a). Note que no tempo  $t = 2000$  os substratos crescentes também concordam com  $\text{Airy}_1$ , começando a desviar na direção de  $\text{Airy}_2$  nos tempos maiores. Portanto, notamos que no platô transiente, onde as curvas concordam com os valores de GOE, a covariância concorda com  $\text{Airy}_1$  independentemente do sinal de  $\omega$ .

Para analisar a covariância temporal, olhando primeiro para os substratos decrescentes, no painel esquerdo da Fig. 4.2 mostramos esta para diferentes modelos em diferentes domínios decrescentes. Para  $t_0$  no intervalo entre  $10^2$  e  $10^3$ , as curvas apresentam um regime de decaimento com  $\beta + d/z = 1$  antes de um decrescimento mais rápido, onde esse final é consequência da diminuição da rugosidade (note que o termo  $(\Gamma t)^\beta$  na reescala do eixo  $y$  supõe que a rugosidade continua crescendo). Assim, notamos que realmente os domínios decrescentes possuem um transiente com a estatística completa  $\text{GOE}-\text{Airy}_1-C_t \sim t^{-1}$ . Já para os domínios crescentes, no painel direito da Fig. 4.2 mostramos as covariâncias do modelo RSOS com  $L_0 = 16 \times 10^4$  e  $\omega = -20$  nos tempos  $t_0 = 100, 500, 1000$  e  $10000$  (da direita para a esquerda). No painel interno está o expoente de decaimento efetivo obtido da inclinação local em cada instante  $t/t_0$ . Nesse gráfico vemos que para tempos longos o expoente efetivo caminha em direção a  $1/3$ , esperado para o caso curvo. Na prática nenhum dos valores ultrapassa  $1/2$ , mas isso deve ser consequência do *crossover* muito lento, pois em tempos muito longos o tamanho inicial deve ser irrelevante. Note que os valores de  $S$  e  $K$  na Fig. 4.1(a) ainda estão muito longe da GUE. Contudo, mais interessante que isso, a curva de  $t_0 = 100$  possui um platô em  $\bar{\lambda}_{eff} = 1$  para  $t_0$  pequeno, concordando com a conjectura para o caso plano. Dessa forma, apesar dos domínios que crescem linearmente no tempo possuírem estatística assintótica  $\text{GUE}-\text{Airy}_2-C_t \sim t^{-\beta}$ , se o tamanho inicial  $L_0$  for muito grande eles apresentam um transiente na estatística  $\text{GOE}-\text{Airy}_1-C_t \sim t^{-1}$ , bem como os sistemas decrescentes, logo a variação no tamanho do substrato é irrelevante durante esse transiente. Finalmente, comparando os nossos resultados com os obtidos nos experimentos com cristais líquidos, podemos concluir que a estatística  $\text{GOE}-\text{Airy}_1$  encontrada naquele sistema deve ser consequência do tamanho inicial grande usado lá, e não do sinal da curvatura como sugerido em [18]. Na verdade, esses resultados experimentais servem como mais uma evidência de que a curvatura em si é irrelevante, importando apenas a combinação do tamanho inicial do substrato com a variação temporal do seu tamanho.

A discussão do paragrafo anterior contrasta com os resultados obtidos em suspensões coloidais. Analisando em detalhes a Figura 3(b) da Ref. [17], notamos que os experimentos envolveram depósitos de altura média da ordem de  $20\mu m$ . Como as partículas que compõe essas superfícies têm diâmetro da ordem de  $1\mu m$ , os depósitos são resultado da deposição de menos que vinte monocamadas. Em simulações de modelos discretos sempre precisamos de muito mais que isso para se atingir o regime assintótico, onde encontramos apenas transientes sem nenhuma evidência de universalidade em poucas monocamadas. De fato, na Fig. 4.3 apresentamos os resultados das simulações de modelos discretos em tempos muito curtos.

## 4.1 Substratos de tamanho decrescente

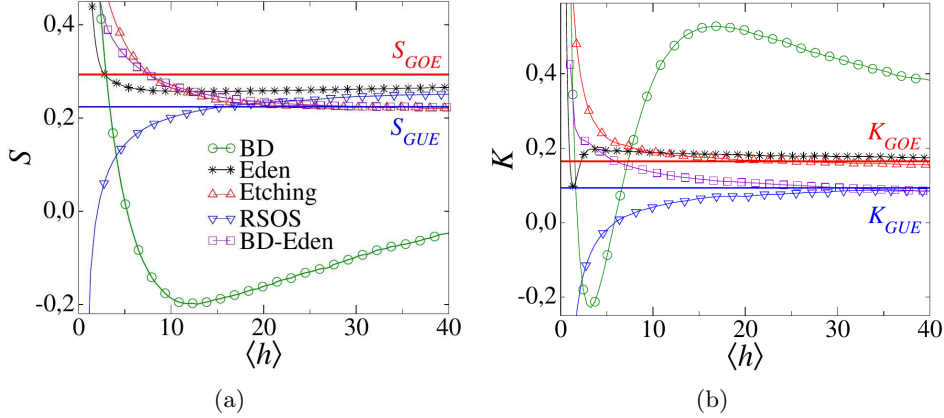


**Figura 4.2:** Covariância temporal dos diferentes modelos nos substratos decrescentes (painel esquerdo) e o modelo RSOS com  $L_0 = 16 \times 10^4$  crescendo com  $\omega = 20$  (painel direito). No modelo de Etching usamos  $L_0 = 8 \times 10^4$  com  $\omega = 40$  (estrela), no RSOS  $L_0 = 6 \times 10^5$  com  $\omega = -20$  (círculos), no SS  $L_0 = 16 \times 10^4$  com  $\omega = -40$  (triângulos). Os valores de  $t_0$  ficaram entre  $10^2$  e  $10^3$  no painel esquerdo, e foram  $t_0 = 100, 500, 1000$  e  $10000$  (do maior para o menor da direita para a esquerda) no painel da direita. O painel interno do lado direito é o expoente efetivo obtido da média das inclinações locais em cada instante  $t/t_0$ .

Consideramos sistemas com  $L_0 = 1600$  e  $\omega = -10$  para Etching, BD e RSOS, e  $\omega = 0$  para Eden e BD-Eden, já que a discussão anterior deixa evidente que em tempos curtos  $\omega$  é irrelevante. Aqui consideramos o modelo de Eden que parte de uma linha reta de partículas em  $h = 0$  ao invés de uma semente no centro de uma rede, produzindo uma superfície sem curvatura global. Nesses gráficos notamos que  $S$  e  $K$  tem um comportamento não universal, podendo eventualmente concordar com GUE nesses tempos curtos. Para produzir um exemplo concreto, simulamos um crescimento competitivo entre o modelo de deposição balística e o modelo Eden B. Esse crescimento consiste em definir uma probabilidade  $p$  de se depositar uma partícula segundo a regra BD, e com a probabilidade complementar  $(1 - p)$  acrescentamos uma partícula de acordo com o modelo de Eden. Na Fig. 4.3 está o resultado desse modelo competitivo com  $p = 0,35$ , que por causa do número pequeno de monocamadas, concorda com os valores da GUE mesmo se tratando de um sistema com tamanho fixo, possuindo distribuição assintótica dada por GOE. É importante ressaltar que esse modelo competitivo não deve descrever bem todos os ingredientes presentes no crescimento na evaporação de gotas com suspensões coloidais. Porém, ele mostra que o número pequeno de monocamadas deve ser o responsável pela conclusão aparentemente errônea de que a distribuição assintótica é dada por GUE na Ref. [17]. Outros equívocos dessa referência foram destacados nas Refs. [132,133]. Realmente, o vídeo no material suplementar publicado nessa referência mostra que esse crescimento com partículas levemente anisotrópicas (excentricidade  $\epsilon = 1,2$ ) envolve a deposição de agregados com diversas partículas, que inclusive se movem consideravelmente mesmo após a sua deposição. Por causa desses efeitos é natural se esperar um número grande de monocamadas para se obter o regime assintótico.

Explorando mais a fundo a HD desses domínios decrescentes, na Fig. 4.4 mostramos o segundo, terceiro e quarto cumulantes dessa distribuição. Na Fig. 4.4(a) vemos que a rugosidade quadrática da superfície realmente alcança um valor máximo antes de começar a decrescer. Nesse gráfico temos apenas o modelo RSOS com diferentes  $L_0$  e  $\omega$ . Como o sistema evolui com  $L = L_0 - |\omega|t$ ,  $\langle L \rangle = 0$  define um tempo característico  $t_c = L_0/\omega$ . Utilizando esse tempo e os valores de  $\Gamma$  [16], podemos reescalar as curvas de rugosidade quadrática,

## 4.1 Substratos de tamanho decrescente



**Figura 4.3:** (a) *Skewness* e (b) *Kurtosis* da HD de diferentes modelos em função da altura média. As linhas sólidas horizontais representam os valores da GOE (vermelho) e GUE (azul).

obtendo o colapso da Fig. 4.4(b). Nessa figura também incluímos os modelos de Etching (triângulos) e SS (quadrados). A reescala com esse  $t_c$  também colapsa  $\langle h^3 \rangle_c$  (Fig. 4.4(c)) e  $\langle h^4 \rangle_c$  (Fig. 4.4(d)), mostrando que  $t_c$  é mesmo a escala temporal relevante nesse sistema. É interessante notar que essa reescala faz os máximos dos diferentes modelos acontecerem em um tempo de *crossover*  $t^* \approx 0,8t_c$  (ver o painel interno de Fig. 4.4(b)). Considerando que essa rugosidade máxima acontece quando o comprimento de correlação alcança o tamanho do sistema  $\xi(t^*) \approx \langle L(t^*) \rangle$ , sendo  $\langle L(t^*) \rangle = L_0 - |\omega|t^*$  encontramos  $t^* \approx t_c(1 - \xi(t^*)/L_0)$ . Podemos obter uma aproximação para esse  $t^*$  considerando a razão  $\xi(t^*)/L_0$  para substratos de tamanho fixo. Nesse caso, a amplitude da rugosidade de saturação é  $W^2 = AL_0^{2\alpha}/12$  [29], e no regime de crescimento  $W^2 = (\Gamma t)^{2\beta} \langle \chi^2 \rangle_c$ . O *crossover* acontece quando essas duas relações se igualam. Sendo  $\Gamma = |\lambda|A^{1/\alpha}/2$  e  $\xi = (\sqrt{A}|\lambda|t)^{1/z}$ , obtemos  $\xi(t^*) = 2^{2/3}L_0/12 \langle \chi^2 \rangle_c$ , que resulta em  $\xi(t^*)/L_0 = 0,207$ , assumindo que  $\chi$  é dada por GOE. Portanto, o *crossover* acontece quando o comprimento de correlação é da ordem de um quinto do tamanho do sistema. Dessa forma,  $t^* \approx t_c(1 - \xi(t^*)/L_0) \approx 0,8t_c$ , que concorda muito bem com os máximos obtidos nas simulações.

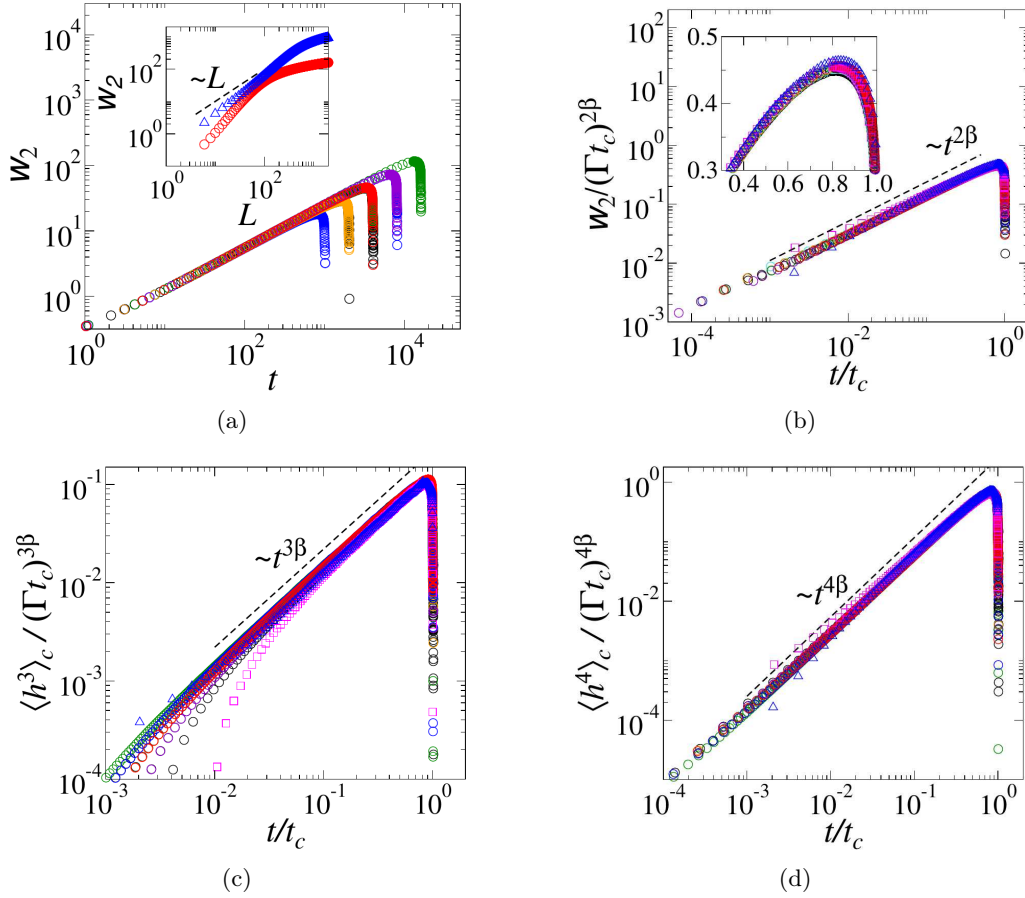
Após o comprimento de correlação alcançar o tamanho do sistema é natural que a rugosidade quadrática passe a escalar como  $W^2 \sim L^{2\alpha}$ , e sendo  $L \sim L_0(1 - t/t_c) \Rightarrow W^2 \sim (1 - t/t_c)$ . Então, a escala da rugosidade é dada por uma relação de Family-Vicsek modificada:

$$W^2 = (\Gamma t_c)^{2\beta} \langle \chi^2 \rangle_c f(t/t_c), \quad \text{com} \quad f(x) = \begin{cases} x^{2\beta} & , \text{se } x \ll 0,8 \\ b(1 - x) & , \text{se } 0,8 \ll x < 1 \end{cases} ,$$

onde  $b$  é uma constante universal. Podemos verificar no painel interno da Fig. 4.4(a) que o modelo RSOS (círculos) visivelmente não segue essa escala no regime  $0,8 \ll x < 1$ , apesar do modelo de Etching (triângulos) desviar menos. Realmente, a condição  $0,8 \ll x < 1$  é muito restritiva, confinando a aplicação da escala desse regime a uma janela muito pequena, que pode impossibilitar a sua verificação. Além disso, nesse regime estamos necessariamente considerando sistemas de tamanho muito pequenos, fazendo com que efeitos de tamanho finito sejam inevitáveis, o que pode dificultar ainda mais a verificação dessa relação de escala. Os modelos com restrição de altura ainda possuem um problema adicional, pois, como a rugosidade é relativamente grande em relação ao tamanho do sistema, a remoção de colunas deve ficar restrita a um pequeno conjunto de opções que não produzem diferenças de alturas



## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo

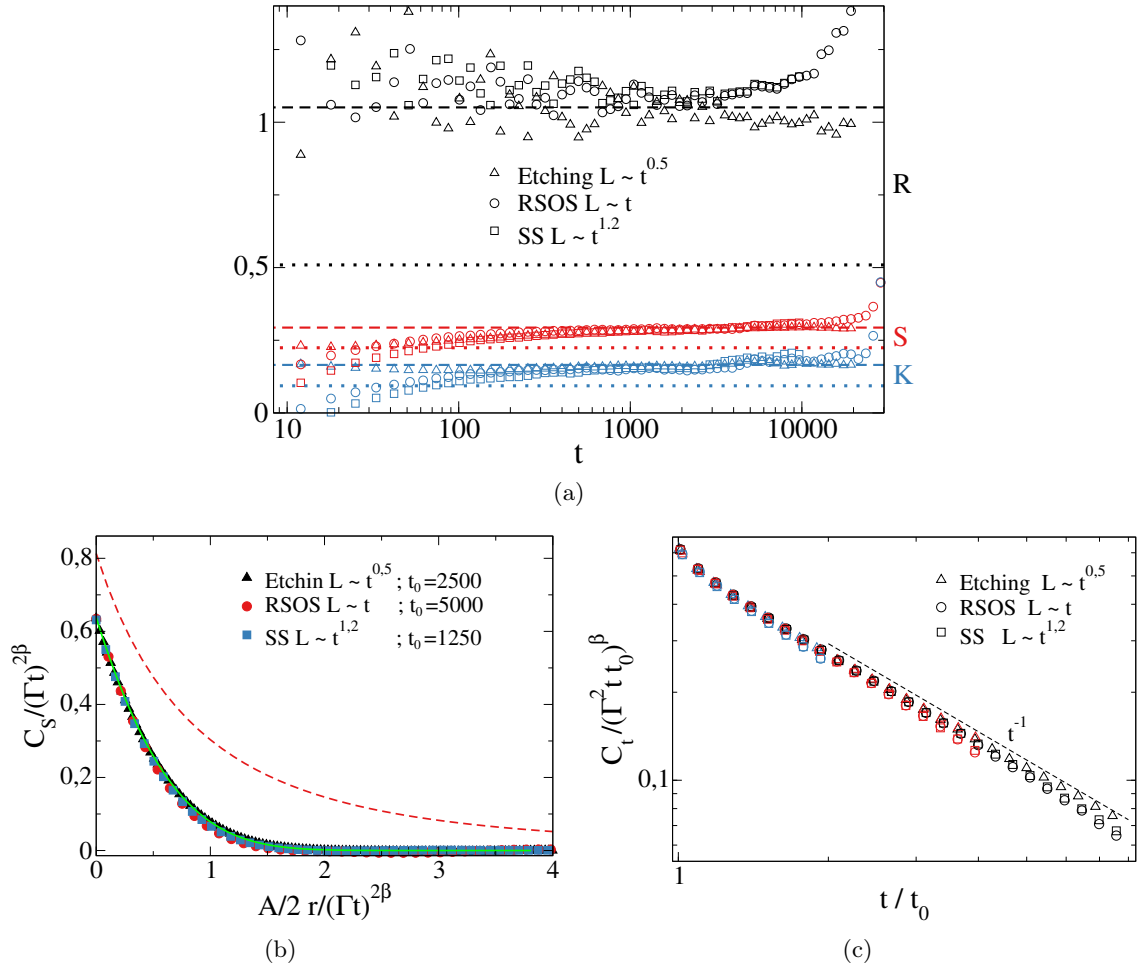


**Figura 4.4:** Cumulantes da HD para substratos decrescentes. (a) Rugosidade quadrática do modelo RSOS com  $L_0 = 4 \times 10^4, 8 \times 10^4$  e  $16 \times 10^4$ , com  $\omega = -10, -20$  e  $-40$ . As combinações desses parâmetros produzem curvas que se sobrepõem se  $t_c = L_0/|\omega|$  for o mesmo. A última curva a decrescer é para  $L_0 = 16 \times 10^4$  com  $\omega = -10$  ( $t_c = 16 \times 10^3$ ), e a que decresce primeiro é para  $L_0 = 4 \times 10^4$  com  $\omega = -40$  ( $t_c = 10^3$ ), as outras curvas são as combinações que produzem  $t_c = 2 \times, 4 \times$  e  $8 \times 10^3$  (da esquerda para a direita). Os demais gráficos são a reescala do segundo (b), terceiro (c) e quarto (d) cumulante da HD. Nesses gráficos incluímos o modelo de Etching (triângulos) e o SS (quadrados).

proibidas. Por isso, a remoção de colunas deve se tornar “enviesada”, o que pode ser o motivo do modelo RSOS desviar mais que o Etching da relação de escala esperada.

Para encerrar a discussão sobre domínios decrescentes, vamos discutir os casos com  $\gamma \neq 1$ . Na Fig. 4.5(a) apresentamos a comparação das razões  $R$ ,  $S$  e  $K$  das distribuições GOE e GUE com os diferentes modelos. Usamos diferentes  $\gamma$ 's, com  $L_0 = 6 \times 10^5$ ,  $\omega = 5$  no modelo SS e  $\omega = 20$  nos demais. Nesse gráfico vemos que as curvas concordam com GOE antes do aumento final, que só deve acontecer em tempos maiores para  $\gamma = 0,5$ . Na Fig. 4.5(b) mostramos as covariâncias espaciais, onde é evidente o acordo com  $\text{Airy}_1$ . Já a covariância temporal, na Fig. 4.5(c), apresenta um decaimento  $C_t \sim t^{-1}$ . Portanto, notamos que os diferentes  $\gamma$ 's concordam com a estatística  $\text{GOE}-\text{Airy}_1-C_t \sim t^{-1}$ , corroborando a conclusão de que, antes do *crossover*, em tamanhos iniciais grandes a dinâmica lateral do substrato é irrelevante.

## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo



**Figura 4.5:** (a) Valores das razões  $R$  (preto),  $S$  (vermelho) e  $K$  (azul) da HD dos diferentes modelos com diferentes  $\gamma$ 's. As linhas tracejadas (pontilhadas) são os valores dessas razões para a GOE (GUE). (b) Covariância espacial dos diferentes modelos,  $\text{Airy}_1$  (linha sólida verde) e  $\text{Airy}_2$  (linha tracejada vermelha). (c) Covariância temporal dos diferentes modelos. Os tempos iniciais foram  $t_0 = 2500$  (preto),  $5000$  (vermelho) e  $10^4$  (azul) para o modelo de Etching, e  $t_0 = 1250, 2500$  e  $5000$  para SS e RSOS, usando a mesma sequência de cores.

## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo

Nesta seção trataremos sistemas com  $L = L_0 + \omega t^\gamma$ , com  $\omega > 0$  e  $0 < \gamma < 1,5$ . Nosso objetivo aqui é estudar em detalhes a competição entre o comprimento de correlação e o tamanho do substrato, generalizando os resultados obtidos em [16]. Assim, a discussão é feita separando os regimes  $\gamma < 1/z$ ,  $\gamma = 1/z$  e  $\gamma > 1/z$ . Note que em tempos longos  $\omega$  deve ser irrelevante se  $\gamma \neq 1/z$ . Para evitar o transiente discutido na seção passada, as simulações aqui sempre começam com  $L_0 = 4$ . É importante ressaltar que as simulações nesta seção podem parecer um pouco abstratas, já que nos sistemas reais conhecidos a variação do tamanho é inevitavelmente relacionada ao número de monocamadas depositadas, ou seja, quando o raio médio aumenta em uma unidade o perímetro médio cresce em exatamente  $2\pi$ , caracterizando uma condição circular. Entretanto, no nosso algoritmo para crescimento lateral do substrato, a dinâmica do tamanho do sistema é desacoplada da variação das alturas, que é justamente o que nos permite estudar a competição entre a propagação das correlação e o crescimento do

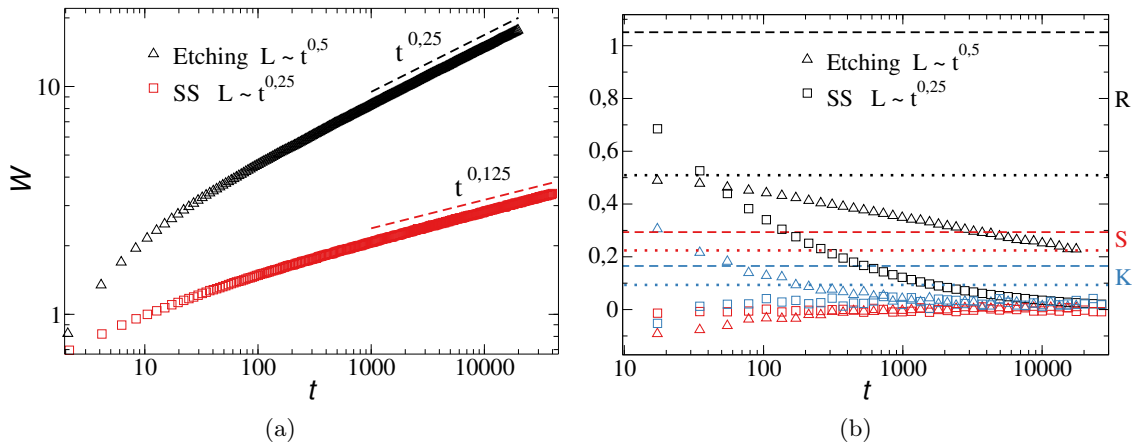
## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo



substrato com diferentes taxas. Consequentemente, seria difícil achar sistemas reais que se assemelham a essas simulações. Do ponto de vista teórico, sistemas análogos aos nossos talvez possam ser construídos alterando a topologia do espaço, como nas Ref. [134,135]. Nessa última referência, os autores consideraram um crescimento confinado a um subespaço cônico. Eles verificam que ao mapear esse cone, e a interface contida nele, em um plano que é perpendicular e toca a ponta desse cone a distribuição de raios era dada por GUE. Substituindo o cone por uma superfície de revolução obtida de uma função  $f(x) \sim x^b$  com  $b \neq 1$ , talvez leve a uma topologia onde os crescimentos são similares as nossas simulações.

### 4.2.1 Resultados para $\gamma < 1/z$

Nesta pequena subseção vamos examinar o que acontece se o tamanho do sistema crescer mais devagar que o comprimento de correlação. Nesse caso, é natural imaginar que o sistema deve se tornar correlacionado. De fato, como a rugosidade de saturação escala com  $W_{sat} \sim L^\alpha$ , é de se esperar que  $W \sim t^{\alpha\gamma}$ . A Fig. 4.6(a) mostra que a rugosidade realmente segue essa escala, que já havia sido proposta e verificada na Ref. [127]. É importante ressaltar que apesar do sistema estar correlacionado, tecnicamente o que obtemos não é um estado estacionário, pois a rugosidade cresce no tempo.



**Figura 4.6:** (a) Rugosidade de domínios que crescem com  $\gamma < 1/z$ . (b)  $R$  (preto),  $S$  (vermelho) e  $K$  (azul) desses mesmos sistemas. As linhas tracejadas (pontilhadas) são os valores dessas razões para a GOE (GUE)

Uma vez que a HD da classe KPZ em  $d = 1$  no estado estacionário é Gaussiana, é interessante verificar a HD desses domínios que crescem lentamente. Na Fig. 4.6(b) traçamos os gráficos de  $R$ ,  $S$  e  $K$  dos modelos SS e Etching, com  $\gamma = 0,25$  e  $\gamma = 0,5$  respectivamente. Nesse gráfico fica evidente que tanto a *Skewness* quanto a *Kurtosis* tendem para zero rapidamente, o que significa que a HD deve ser Gaussiana. A razão  $R$  também tende a zero porque, enquanto a média das alturas cresce livremente, o aumento da rugosidade fica limitado pelo tamanho do sistema, que cresce de forma relativamente lenta.

### 4.2.2 Resultados para $\gamma = 1/z$

Como visto na subseção anterior, quando  $\gamma \rightarrow 1/z$  por baixo a rugosidade deve escalar com  $W \sim t^{\alpha\gamma}$ , mas nesse caso  $\alpha\gamma \rightarrow \alpha/z \rightarrow \beta$ , assim a rugosidade escala com o expoente do regime de crescimento (ver Fig. 4.9(a) mais a frente). A taxa de crescimento do substrato

## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo

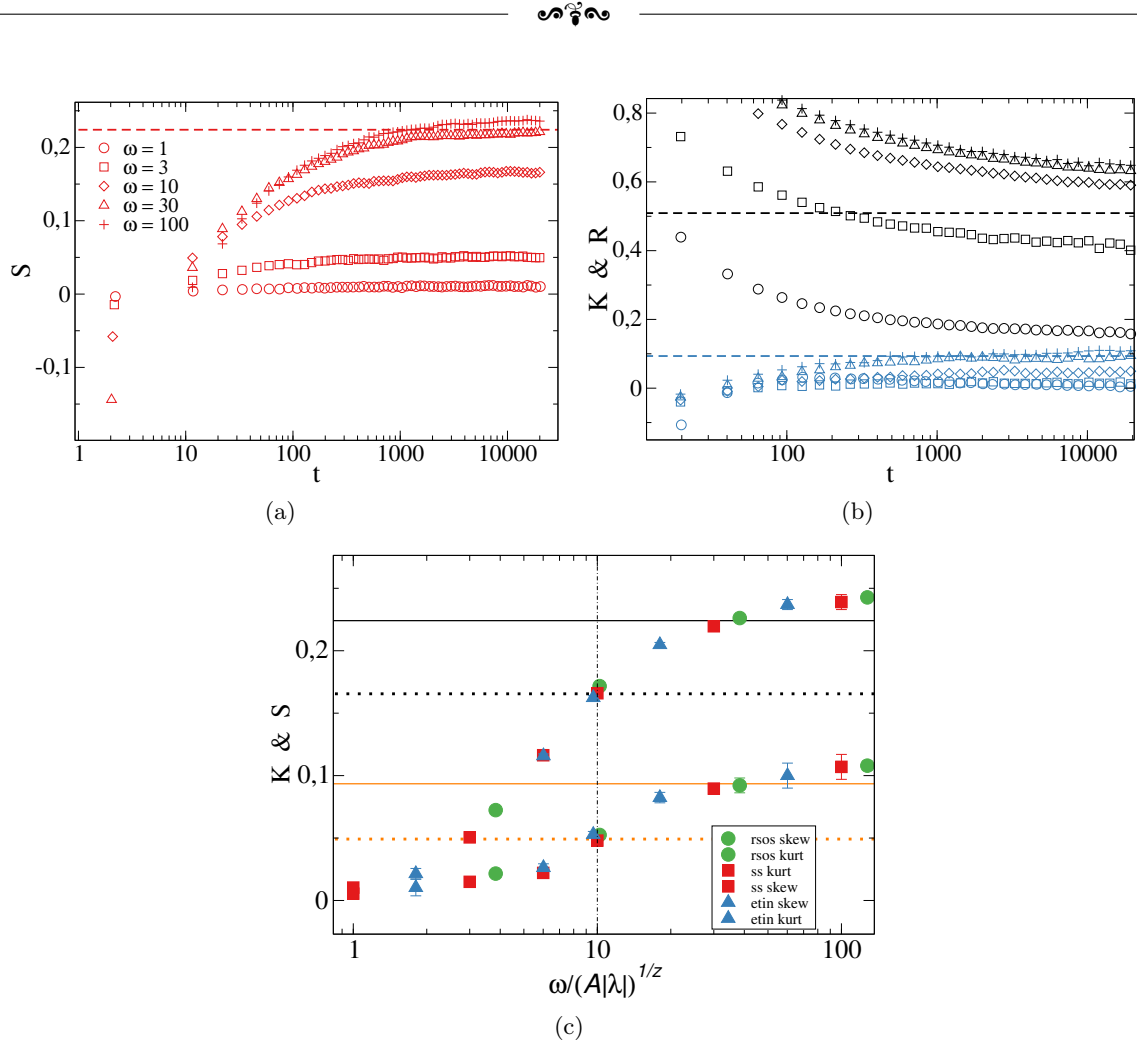


e do comprimento de correlação são da mesma ordem mesmo no regime assintótico. Por isso a amplitude  $\omega$  deve ser o fator mais relevante nesse caso. Como o comprimento de correlação é dado por  $\xi(t) = (A|\lambda|t)^{1/z}$ , é de se esperar que se  $\omega \ll (A|\lambda|)^{1/z}$  o sistema se torne correlacionado, enquanto  $\omega \gg (A|\lambda|)^{1/z}$  deve resultar em uma HD não-Gaussiana. Realmente, as Figs. 4.7(a) e 4.7(b) mostram que, aumentando  $\omega$  entre 1 e 100, os valores das razões  $S$  e  $K$  variam de zero (Gaussiana) para próximos daqueles da GUE. A razão  $R$  fica mais distante dos valores esperados, o que deve acontecer por causa das fortes correções presentes na altura média. Em [16] mostramos que as duplicações são responsáveis por correções logarítmicas, na subseção 4.2.4 vamos generalizar os cálculos para o caso não-linear, onde vamos verificar que as correções são ainda mais fortes se  $\gamma < 1$ . Voltando ao assunto, é interessante notar como a amplitude  $\omega$  precisa ser relativamente grande para que a distribuição se aproxime de GUE, pois o comprimento de correlação é dado por  $\xi(t) = t^{1/z}$  para o modelo SS,  $\xi(t) \approx 0,783t^{1/z}$  para o RSOS e  $\xi(t) \approx 1,663t^{1/z}$  para o Etching. Isso deve ser consequência do *crossover* para o regime de saturação ser marcado por  $\xi/L = 0,207$ . Lembrando que a região de *crossover* é relativamente extensa (ver Fig. 2.7(a)), razões pouco menores também devem estar fora do regime de crescimento. Então, é de se esperar que  $\omega$  deva ser bem maior que  $(A|\lambda|)^{1/z}$  para se evitar completamente os efeitos do *crossover* para o estado estacionário. Mesmo assim, é de certa forma impressionante que domínios que crescem marginalmente mais rápido (mesmo expoente) que o comprimento de correlação já apresentem a distribuição GUE.

Algo especialmente interessante sobre este regime pode ser observado analisando a HD em função de  $\omega$ . Pela discussão do parágrafo anterior, é natural se esperar que a escala relevante nesse caso seja  $\omega/(A|\lambda|)^{1/z}$ . Na Fig. 4.7(c) mostramos  $S$  e  $K$  em função dessa razão para cada modelo (omitimos  $R$  por ele possuir fortes correções). Nesse gráfico notamos que em  $\omega/(A|\lambda|)^{1/z} \approx 10$  a HD dos três modelos concordam com distribuição do Ensemble Gaussiano Simplético (GSE). De fato, como os valores da GSE estão entre os da Gaussiana e GUE, inevitavelmente  $S$  e  $K$  passariam por esses valores em algum ponto, mas essas duas razões, para todos os modelos, cruzam simultaneamente a GSE aproximadamente em um mesmo valor de  $\omega/(A|\lambda|)^{1/z}$ . Portanto, podemos pensar que temos um ponto GSE entre a Gaussiana e a GUE.

Na realidade, analisando com cuidado os gráficos da Fig. 4.7, notamos que tanto a *Skewness* quanto a *Kurtosis* ultrapassam ligeiramente os valores esperados para GUE nos  $\omega$ 's grandes. Para entendermos porque isso acontece analisamos na Fig. 4.8(a)  $S$  e  $K$  do modelo SS com  $\gamma = 0,5$ ,  $L_0 = 4$  e  $\omega = 400$ . Note que o  $L_0$  usado é pequeno e, como  $\gamma < 1/z$ , assintoticamente a distribuição deve ser Gaussiana. Os valores elevados de  $S$  e  $K$  observados nessa figura devem acontecer porque nos primeiros passos de tempo, enquanto a superfície ainda é bem lisa, acontecem várias duplicações, o que efetivamente é similar a começar com um tamanho inicial grande. Assim, podemos concluir que uma amplitude  $\omega$  muito grande também pode induzir um transiente inicial semelhante ao discutido na seção passada. Estimando o tempo necessário para  $\xi(t) = \langle L \rangle$ , nesse caso obtemos  $t \sim 10^{15}$ , logo o transiente deve ser muito extenso. Provavelmente é por isso que não conseguimos notar um máximo na Fig. 4.8(a). Além disso, esse transiente inicial também é mais extenso pelo  $\gamma < 1$ , como podemos ver na Fig. 4.8(b). Esse gráfico é análogo à Fig. 2.16(c), mas aqui acrescentamos os resultados do mesmo modelo (RSOS) com mesmo  $\omega = 20$  e  $L_0 = 8 \times 10^4$  (asteriscos), mas usando expoentes  $\gamma = 0,85$  (preto),  $1/z$  (vermelho) e  $0,5$  (azul). Nesse gráfico podemos notar que os máximos ficam mais altos quando  $\gamma$  diminui, o que seria equivalente a aumentar  $L_0$  quando  $\gamma = 1$  e, como os  $\Delta L$ 's produzidos em um mesmo tempo final são menores, o *crossover* fica mais extenso. Portanto, a combinação desses dois efeitos,  $\omega$  grande produzir um transiente que é ainda mais extenso por  $\gamma < 1$ , deve ser responsável pelo desvio para cima observado na Fig.

## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo



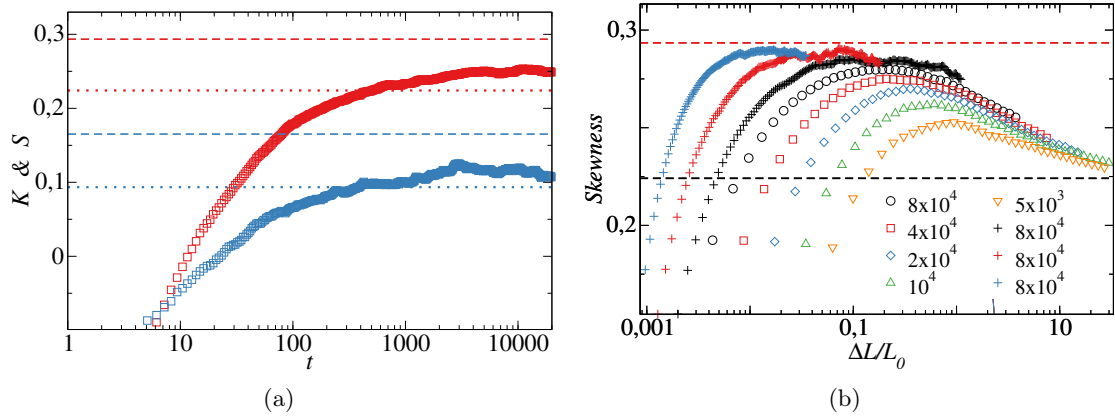
**Figura 4.7:** Valores de  $S$  (a),  $R$  e  $K$  (b) do modelo SS com  $\gamma = 1/z$  e  $\omega = 1, 3, 10, 30$  e  $100$  (de baixo para cima). As linhas tracejadas são os valores dessas razões da distribuição GUE. (c) Valor assintótico de  $S$  (acima) e  $K$  (abaixo) como função de  $\omega/(A|\lambda)^{1/z}$  dos modelos de Etching (triângulos), RSOS (círculos) e SS (quadrados). As linhas sólidas são os valores da GUE e a pontilhada da GSE.

4.7 para  $\omega \gg 1$ . Essa discussão fica mais convincente considerando os resultados da próxima seção, onde mostramos  $1/z < \gamma < 1$  com  $\omega$ 's menores, que assintoticamente crescem mais rápido que os substratos desta subseção, produzem distribuições GUE. Deixamos algumas discussões das CI's que se aproximam da GUE ( $\omega \sim 30$  com  $\gamma = 1/z$ ) para a próxima seção.

### 4.2.3 Resultados para $\gamma \geq 1/z$

Agora vamos analisar os domínios que crescem mais rápido que o comprimento de correlação. Olhando primeiro para a rugosidade, na Fig. 4.9(a) traçamos essa grandeza em função do tempo para diversos valores de  $\gamma$  no modelo SS. No painel interno vemos que o expoente de crescimento é próximo do esperado para KPZ em  $d = 1$  ( $\beta = 1/3$ ). No entanto, podemos notar que a amplitude da rugosidade cresce com  $\gamma$ . O ansatz no regime de crescimento mostra que  $W = (\Gamma t)^\beta \langle \chi^2 \rangle_c$ , logo a amplitude  $g_2 = \Gamma^\beta \langle \chi^2 \rangle_c$  depende de  $\gamma$ . Essa variação fica mais clara na Fig. 4.9(b), onde traçamos  $g_2$  como função de  $\gamma$  também para o modelo SS. No painel principal temos o valor de  $g_2$  como função de  $\gamma$  com  $\omega = 20$ , onde realmente notamos uma variação considerável. As linhas tracejadas horizontais são os valores

## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo



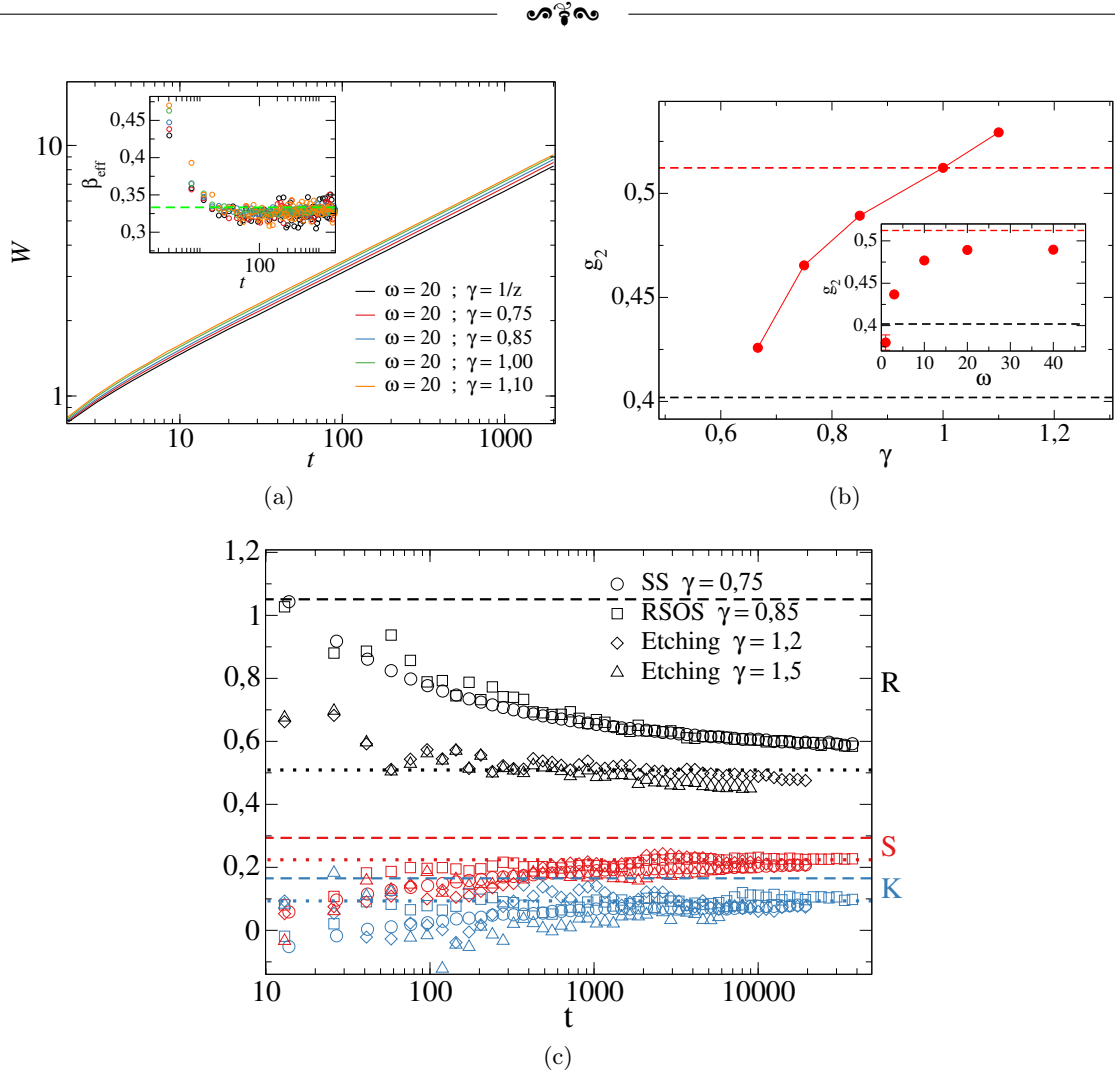
**Figura 4.8:** (a)  $S$  e  $K$  do modelo SS com  $L_0 = 20$ ,  $\omega = 400$  e  $\gamma = 0,5$ . As linhas tracejadas são os valores de  $S$  (vermelho) e  $K$  (azul) da GOE, as linhas pontilhadas são o mesmo para a GUE. (b)  $S$  do modelo RSOS com diferentes  $L_0$  (legenda), com  $\omega = 20$  para todos. As cruces são os resultados com  $\gamma = 0,85$  (preto),  $1/z$  (vermelho) e  $0,5$  (azul). Nesse caso, a linha tracejada vermelha é o valor de  $S$  da GOE e a preta o valor da GUE.

dessa grandeza usando o  $\gamma = 1$  (de substratos com tamanho fixo) e  $\langle \chi_{GOE}^2 \rangle_c$  (abaixo) ou  $\langle \chi_{GUE}^2 \rangle_c$  (acima). É interessante perceber que em  $\gamma = 1$ ,  $g_2$  cruza a linha tracejada superior, que seria a amplitude esperada para uma interface curva. Mais a frente vamos retomar esse assunto. Para verificar a influência de  $\omega$  em  $g_2$ , no painel interno temos o valor dessa grandeza para vários  $\omega$ 's mantendo  $\gamma = 0,85$  fixo, onde notamos uma variação maior apenas na região  $\omega < 10$ . Dessa forma, reiteramos que o valor de  $g_2$  realmente varia consideravelmente com a velocidade de crescimento do substrato.

Para identificar se o fator  $\Gamma^\beta$  ou  $\langle \chi^2 \rangle_c$  é o responsável pela variação de  $g_2$ , olhamos para as razões de cumulantes  $R$ ,  $S$  e  $K$ , onde, por serem adimensionais, o fator  $\Gamma$  se cancela. Analisando a Fig. 4.9(c), podemos concluir que essas razões concordam com os valores da GUE, sem ter uma variação expressiva com  $\gamma$ , lembrando novamente que o  $R$  possui fortes correções. Portanto, concluímos que a velocidade de crescimento do substrato afeta o parâmetro não universal  $\Gamma$ , sem afetar a distribuição  $\chi$ . Essa discussão nos permite constatar algo interessante, que basta o domínio crescer com  $\gamma$  ligeiramente maior que  $1/z$  para a HD ser dada pela GUE e, mesmo para taxas de expansão do substrato assintoticamente grandes (o caso  $\gamma > 1$ ) essa distribuição se mantém.

Sabendo que a HD é dada pela GUE, podemos usar o valor de  $g_2$  e obter  $\Gamma$  para a cada velocidade lateral. De posse desse valor, podemos olhar para as covariâncias temporais. No painel interno da Fig. 4.10(a) apresentamos essa covariância para diferentes modelos com diferentes  $\gamma$ 's. Nos sistemas com  $\gamma > 1$ , tivemos que usar valores de  $\omega$  menores porque o tamanho do substrato cresce rápido demais (sendo  $\omega = 5$  em  $\gamma = 1,2$  e  $\omega = 1$  em  $\gamma = 1,5$ ), nos demais casos usamos  $\omega = 20$ . Nesse gráfico vemos que a forma da curva da covariância varia com a taxa de expansão e, portanto, ela é não-universal. Note que isso não é um efeito de tempo finito, pois esse painel interno inclui curvas para diferentes  $t_0$ , que colapsam tão bem para um dado  $\gamma$  que é difícil notar que há mais de uma curva. No painel principal mostramos o expoente efetivo de decaimento para cada  $\gamma$ , usando a mesma cor que o painel interno com diferentes símbolos. Aqui percebemos que, apesar da discordância na forma, as curvas se aproximam bem mais da conjectura do caso curvo ( $C_t \sim t^{-\beta}$ ) que a do caso plano ( $C_t \sim t^{-1}$ ).

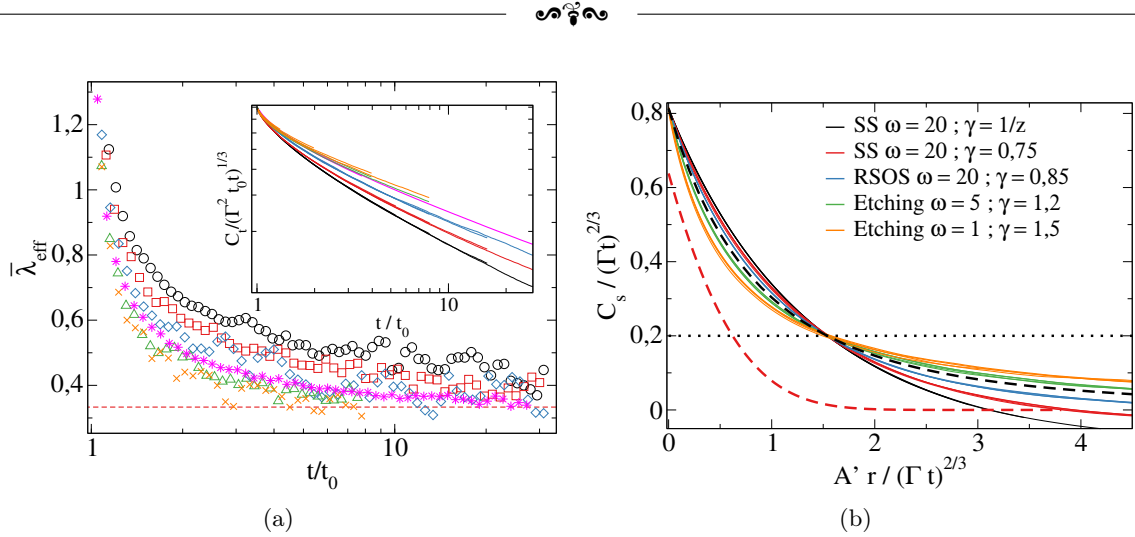
## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo



**Figura 4.9:** (a) Rugosidade do modelo SS com diferentes  $\gamma$ 's e  $\omega$ 's. O painel interno mostra o expoente de crescimento efetivo calculado de derivadas locais. (b) Amplitude da rugosidade do modelo SS em como função de  $\gamma$ , mantendo  $\omega = 20$ . No painel interno variamos  $\omega$  mantendo  $\gamma = 0,85$  fixo. (c)  $R$  (preto),  $S$  (vermelho) e  $K$  (azul) de diferentes modelos com diferentes  $\gamma$ 's. As linhas tracejadas (pontilhadas) são os valores dessas razões para a GOE (GUE). Usamos  $\omega = 20$  para  $\gamma < 1$ ,  $\omega = 5$  para  $\gamma = 1,2$  e  $\omega = 1$  para  $\gamma = 1,5$ .

Para analisar a covariância espacial, precisamos do parâmetro  $A$ . Como o valor de  $\Gamma$  varia, sendo  $A = (2\Gamma/|\lambda|)^\alpha$ , esse parâmetro também deve depender de  $\gamma$  e  $\omega$ . Para obtê-lo, precisaríamos saber como  $\lambda$  varia com esses parâmetros. A maneira mais comum de se obter o valor de  $\lambda$  é considerar sistemas com diferentes inclinações, e verificar como a  $v_\infty$  varia com essas inclinações (ver Ref. [33]). Todavia, o crescimento lateral do substrato faria, efetivamente, essa inclinação diminuir ao longo do tempo, inviabilizando esse método. Assim, sem conhecer o valor de  $A$ , a opção que temos é usar um valor  $A'$  que iguala as curvas da covariância espacial em uma linha de referência arbitrária. Na Fig. 4.10(b) comparamos as curvas de covariância dos diferentes modelos para vários  $\gamma$ 's com as curvas  $\text{Airy}_1$  e  $\text{Airy}_2$ . Naturalmente as curvas iniciam em uma posição no eixo  $y$  próxima da  $\text{Airy}_2$ , pois  $C_s(0,t) = W^2$  e, daí,  $C_s(0,t)/(\Gamma t)^{2/3} = \langle \chi^2 \rangle_c$ . Porém, vemos que as curvas variam com  $\gamma$ , e nenhuma das curvas concorda realmente com a  $\text{Airy}_2$ . Além disso, a forma como as curvas variam em função de  $\gamma$  deixa evidente que em  $\gamma = 1$  acontece um cruzamento entre as covariâncias e

## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo



**Figura 4.10:** Covariância temporal (a) dos diferentes modelos com diferentes  $\gamma$ 's. O painel interno mostra a curva completa e o painel principal mostra os expoentes efetivos de decaimento. (b) Comparação entre a covariância espacial dos diferentes modelos com as curvas  $\text{Airy}_1$  (tracejada abaixo) e  $\text{Airy}_2$  (tracejada acima). Ambos os gráficos incluem curvas com diferentes tempos para cada caso. A covariância temporal considera os  $t_0$  no intervalo entre  $t_f/8$  e  $3t_f/4$ , onde  $t_f$  é o tempo final da simulação. Já a covariância espacial foi feita em tempos no intervalo  $t_f/2$  e  $t_f$ . Os dois gráficos usam os mesmos modelos e parâmetros. A curva preta é para o modelo SS com  $\gamma = 1/z$  e  $\omega = 20$  ( $t_f = 4 \times 10^4$ ), a vermelha é para o SS com  $\gamma = 0,75$  e  $\omega = 20$  ( $t_f = 4 \times 10^4$ ), a azul é o RSOS com  $\omega = 0,85$  com  $\omega = 20$  ( $t_f = 4 \times 10^4$ ), verde é para o Etching com  $\omega = 1,2$  com  $\omega = 5$  ( $t_f = 2 \times 10^4$ ) e a laranja é o mesmo modelo com  $\omega = 1,5$  e  $\omega = 1$  ( $t_f = 1 \times 10^4$ ). Na figura (a) incluímos o modelo RSOS com  $\gamma = 1$  e  $\omega = 20$  (magenta) para ilustrar a forma da covariância temporal em interfaces curvas.

$\text{Airy}_2$ . Finalmente, é importante destacar que as curvas de covariância espacial cruzam o zero quando  $\gamma < 1$ , o que só pode significar que existe um comprimento característico. Como não notamos um mínimo local esse comprimento deve ser da ordem do tamanho do sistema.

Considerando os resultados apresentados nesta subsecção, notamos que enquanto a HD é dada pela GUE se  $\gamma > 1/z$ , os parâmetros não-universais e as covariâncias dependem da taxa de crescimento do substrato. Apesar do expoente efetivo do decaimento da covariância temporal se aproximar da conjectura válida no caso curvo, a forma completa da função (vamos chama-la de  $\Phi_2$ ) só é obtida em  $\gamma = 1$ , lembrando que essa forma é conhecida de experimentos e simulações, sem derivações analíticas até o momento. O mesmo é verdade para a forma da covariância espacial, concordando com  $\text{Airy}_2$  apenas se  $\gamma = 1$ . Portanto, a estatística completa GUE- $\text{Airy}_2$ - $\Phi_2$  só é obtida em  $\gamma = 1$ , note que aqui é necessário distinguir entre a lei de decaimento da covariância temporal e sua forma completa. Algo similar também acontece com os parâmetros não universais. Voltando a Fig. 4.9(b), notamos que quando  $\gamma = 1$  o valor de  $\Gamma$  se torna igual ao caso com substrato de tamanho fixo. Pelo acordo verificado na Ref. [16], o mesmo deve ser verdade para os demais parâmetros. Esses resultados são de certa forma impressionantes, já que a distribuição GUE normalmente aparece acompanhada de  $\text{Airy}_2$  e  $\Phi_2$ . Então, notamos que diversas propriedades desses domínios crescentes variam continuamente com a taxa de expansão, coincidindo com a geometria curva apenas em  $\gamma = 1$ , que é a condição que imita precisamente a evolução do tamanho da zona ativa em agregados circulares. Esses resultados acabam nos fazendo lembrar dos apresentados na Ref. [136]. Lembrando que a distribuição de Baik-Rains é obtida quando a altura é medida em relação a uma condição inicial equivalente a um perfil de alturas no estado estacionário. Nesse trabalho, os



## 4.2 Domínios que crescem de forma não linear no tempo



autores estudaram a HD do modelo TASEP em condições iniciais homogêneas de diferentes densidades. Numa linguagem mais apropriada a essa tese, o que eles fizeram foi equivalente a considerar uma condição inicial no estado estacionário com amplitude de flutuações diferentes das do modelo em questão, um movimento browniano com constante de difusão que produz uma variância diferente da rugosidade quadrática de saturação. Um exemplo fácil de se entender seria crescer o modelo de Etching sobre uma condição inicial extraída do estado estacionário do modelo RSOS. Olhando para a HD partindo de diferentes condições iniciais, eles verificaram que a distribuição obtida só concorda com a Baik-Rains se a amplitude das flutuações dessa condição inicial for a mesma que a do sistema em questão no estado estacionário. Eles obtêm uma família de distribuições interpolando a GOE, na condição inicial lisa, com a Baik-Rains quando a constante de difusão do movimento browniano inicial tem a amplitude correspondente às flutuações do modelo em questão, ver Fig. 3 dessa referência. Dessa forma, assim como a distribuição Baik-Rains exige um “ajuste fino” das amplitudes das flutuações iniciais para ser verificada, a estatística GUE-Airy<sub>2</sub>-Φ<sub>2</sub> exige um  $\gamma = 1$  para ser observada.

### 4.2.4 Correções

Para finalizar, vamos estimar as correções que aparecem como consequência das duplicações nesses domínios que crescem com  $\gamma \neq 1$ , generalizando os cálculos de [16]. Considerando a média da equação KPZ (eq. 2.22), as condições de contorno periódicas garantem que  $\langle \nabla^2 h \rangle = 0$ . Isso pode ser facilmente verificado em uma dimensão notando que

$$\left\langle \frac{d^n h}{dx^n} \right\rangle = \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} \frac{d^n h}{dx^n} dx = \frac{1}{L} \left( \frac{d^{n-1} h}{dx^{n-1}} \Big|_{x_0+L} - \frac{d^{n-1} h}{dx^{n-1}} \Big|_{x_0} \right) . \quad (4.1)$$

Em uma função de período  $L$ ,  $h(x) = h(x + L)$ , logo  $d^n h(x)/dx^n = d^n h(x + L)/dx^n$ , isso implica em 4.1 ser igual a zero.

Já o termo  $(\nabla h)^2$  é afetado pelas duplicações. Considerando a média desse termo

$$G_t = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^{L^d} (\nabla h_i)^2 ,$$

para verificar explicitamente os efeitos das duplicações, nos desconsideramos as deposições e verificamos como esse  $G_t$  varia em uma unidade de tempo. O número médio de duplicações que acontecem em uma unidade de tempo é  $l = dL/dt = \gamma \omega t^{\gamma-1}$ . Dessa forma teremos

$$G_{t+1} = \frac{1}{(L+l)^d} \left[ \sum_{i=1}^{L^d} (\nabla h_i)^2 + \sum_{i=L^d+1}^{(L+l)^d} (\nabla h_i)^2 \right] , \quad (4.2)$$

onde a segunda soma é feita sobre os sítios duplicados e a primeira é sobre o restante da superfície. Considerando que, estatisticamente, cada sítio contribui com uma mesma quantia em  $G_t$ , fazemos

$$\sum_{i=L^d+1}^{(L+l)^d} (\nabla h_i)^2 \approx \frac{d-1}{d} \left[ (L+l)^d - L^d \right] G_t ,$$

onde a fração  $(d-1)/d$  aparece por causa da suavização causada pelas duplicações, pois  $\partial h_j / \partial x_k = 0$  no sítio  $h_j$  duplicado na direção  $x_k$ . Usando a equação anterior em 4.2 e

### 4.3 Domínios que crescem de forma não linear no tempo



considerando  $\sum_{i=1}^{L^{d_s}} (\nabla h_i)^2 = L^{d_s} G_t$  obtemos

$$G_{t+1} \approx \left( 1 - \frac{1}{d} \left[ 1 - \left( \frac{L}{L+l} \right)^d \right] \right) G_t.$$

Para  $L_0$  pequeno, podemos considerar que  $L \approx \omega t^\gamma$  em  $t \gg 1$ , o que resulta em  $\frac{L+l}{L} \approx 1 + \frac{\gamma}{t}$ , que é próximo de um em tempos grandes. Desconsiderando termos de  $\mathcal{O}(t^{-2})$  obtemos

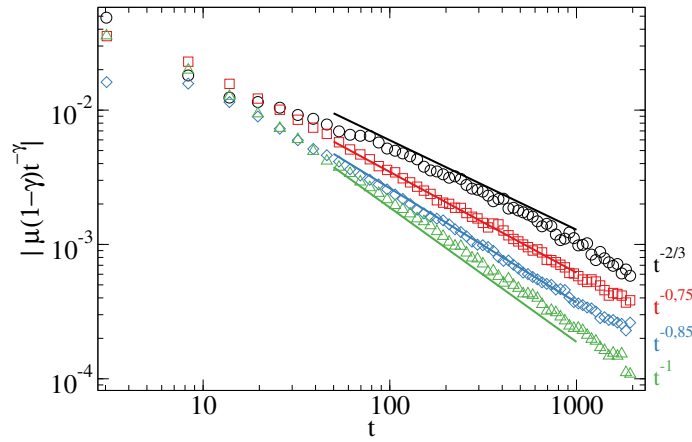
$$G_{t+1} - G_t \approx -\frac{\gamma}{t} G_t \quad , \text{ ou } \quad \frac{dG}{dt} \approx -\frac{\gamma}{t} G,$$

que resulta em  $G_t \sim t^{-\gamma}$ . Note como  $\gamma = 1$  recupera o resultado da ref. [16].

De acordo com os cálculos desenvolvidos até aqui, o efeito acumulado das duplicações deve ser uma correção do tipo  $\mu t^{1-\gamma}$ . Assim, a inclusão da correção no ansatz (Eq. 2.30) resulta em

$$h = v_\infty t + \text{sgn}(\lambda)(\Gamma t)^\beta \chi + \mu t^{1-\gamma} + \dots$$

onde  $t^{1-\gamma}$  é substituído por  $\ln t$  se  $\gamma = 1$ . Note que quanto menor o  $\gamma$ , mais forte a correção.



**Figura 4.11:** Correções obtidas nas simulações. As curvas de baixo para cima são para o SS com  $\gamma = 1$ , o RSOS com  $\gamma = 0,85$ , o SS com  $\gamma = 0,75$  e o Etching com  $\gamma = 2/3$ . Para o modelo de Etching usamos  $\omega = 30$ , e  $\omega = 20$  nos demais.

Para verificar se a nossa dedução condiz com os resultados das simulações, tomamos a derivada do ansatz e isolamos a correção. Como podemos ver na Fig. 4.11, no intervalo  $1/z \leq \gamma \leq 1$  as correções são coerentes com os cálculos dessa subseção. Lembrando que o ansatz não é válido para  $\gamma < 1/z$ , pois a superfície se torna correlacionada e ele é proposto para o regime de crescimento. Para  $\gamma > 1/z$  as correções se tornam desprezíveis, já que  $1 - \gamma < 0$ .

### 4.3 Conclusão

Neste capítulo estudamos em detalhes as propriedades do crescimento KPZ em domínios cujos tamanhos crescem e decrescem com diferentes velocidades. Mostramos que sistemas com tamanhos iniciais grandes sempre têm um transiente inicial com a estatística  $\text{GOE-Airy}_1 - C_t \sim t^{-1}$ , independentemente taxa com que o substrato cresce ou diminui. Nossos resultados concordam com os obtidos em experimentos de cristal líquido com interfaces

### 4.3 Domínios que crescem de forma não linear no tempo

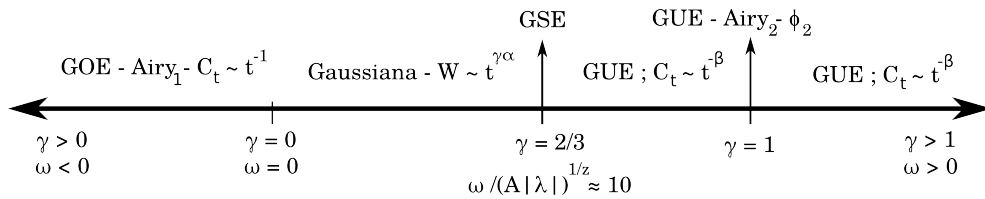


curvas decrescentes [18]. No entanto, enquanto os autores de [18] argumentam que a estatística obtida é fruto do sinal da curvatura da interface, os nossos resultados mostram que a curvatura não tem papel algum na estatística. Por consequência, os nossos resultados discordam dos obtidos na deposição de partículas coloidais nas bordas de gotas em evaporação [17], onde os autores reportam que a HD dos depósitos com partículas pouco anisotrópicas (excentricidade  $\varepsilon = 1,2$ ) é dada pela GUE. Argumentamos que os resultados desses experimentos foram obtidos com poucas monocamadas, da ordem de vinte, e mostramos que nesses tempos iniciais as distribuições são dominadas por transientes não universais.

Em substratos que crescem mais devagar que o comprimento de correlação ( $\gamma < 1/z$ ), a HD é Gaussiana, como ocorre em substratos de tamanho fixo após a saturação da rugosidade. Porém, como o tamanho do sistema não é fixo, a rugosidade não satura. Contudo, a sua escala passa a ser limitada pelo tamanho do sistema, pois, como  $W \sim L^\alpha$  e  $L \sim t^\gamma$ , a rugosidade acaba escalando com  $W \sim t^{\gamma\alpha}$ , de acordo com os resultados de [127,128].

Nos domínios que crescem com o mesmo expoente que o comprimento de correlação, a amplitude  $\omega$  se torna mais relevante. Nesse caso, a medida que  $\omega$  varia entre 1 e 100, uma família de distribuições interpolando entre Gaussiana e GUE existem. Assim, mesmo sistemas que crescem marginalmente (mesmo expoente) mais rápido que o comprimento de correlação possuem HD dada pela GUE. Além disso, curiosamente, verificamos que em  $\omega/(A|\lambda|)^{1/z} \approx 10$  a HD é dada pela GSE, onde  $(A|\lambda|)^{1/z}$  é a amplitude do comprimento de correlação. Isso sugere fortemente que a relação entre a classe KPZ em  $d = 1$  e matrizes aleatórias é mais estreita que o imaginado.

Já os domínios que crescem mais rápido que o comprimento de correlação ( $\gamma > 1/z$ ) apresentaram comportamentos não-universais um tanto inesperados. A HD concorda com a GUE em todos os casos que consideramos ( $1/z \geq \gamma \geq 1,5$ ). Entretanto, a forma das curvas de covariância variam com  $\gamma$ , concordando com as obtidas no caso curvo apenas quando  $\gamma = 1$ , apesar do decaimento da covariância temporal seguir um expoente muito próximo da conjectura  $C_t \sim t^{-\beta}$  do caso curvo. Dessa forma, podemos dizer que, apesar da HD ser dada por GUE, apenas quando  $\gamma = 1$  a estatística completa da subclasse curva é obtida.



**Figura 4.12:** Resumo dos resultados obtidos para cada combinação  $\gamma$  e  $\omega$ .

Os resultados apresentados aqui deixam evidente que a competição entre a evolução do comprimento de correlação e a do tamanho do sistema tem papel fundamental na subdivisão da classe KPZ. Pensando em uma espécie de espaço de fase desses domínios com tamanho que varia no tempo, a Fig. 4.12 resume de forma concisa as nossas conclusões. Os resultados para substratos decrescentes estão submetidos para publicação como *Rapid Communication* na PRE. O restante está em fase final de preparação para submissão.

## Capítulo 5

# Dependência das classes VLDS, EW e MH com as CI's

No capítulo passado discutimos em detalhes como diferentes CI's alteram as propriedades estatísticas da classe KPZ. É natural se perguntar se isso é uma exclusividade dessa classe ou algo mais geral. Neste capítulo vamos mostrar que as demais classes também apresentam uma subdivisão produzida pela CI. Aqui, vamos nos limitar a sistemas com tamanho fixo e sistemas que crescem linearmente, onde  $L = L_0 + \omega t$ , com  $\omega$  positivo e  $L_0 \approx \omega$ . Será dado um enfoque maior à classe VLDS por sua equação ser não-linear e, conseqüentemente, ser um problema mais desafiador do ponto de vista analítico.

### 5.1 Universalidade e subdivisão da classe VLDS

Ao examinarmos o volume de conhecimento acumulado sobre a classe de universalidade KPZ e a VLDS fica evidente que, apesar de MBE ser uma das principais técnicas de crescimento de filmes finos, o modelo teórico MBE não-linear (VLDS) se encontra muito defasado em relação à classe KPZ. Como já apresentado na Sec. 2.6, a classe KPZ possui resultados para a sua HD, no regime estacionário e de crescimento, e covariâncias espaciais, analíticas em uma dimensão e numéricas em duas. Já a classe VLDS possui apenas  $S$  da HD no regime de crescimento, além de  $S$  e  $K$  no estado estacionário em duas dimensões, que de fato é a dimensão mais relevante pensando na deposição de filmes finos. Enquanto a covariância temporal possui conjecturas gerais, mas que ainda não foram testadas na classe VLDS. Além dessas diferenças, a classe KPZ possui um conjunto de equações, coloquialmente conhecidas como "*KPZ toolbox*", que faz a conexão entre os parâmetros não-universais da equação com os parâmetros diretamente mensuráveis da superfície, como os do ansatz  $h = v_\infty t + (\Gamma t)^\beta \chi$ . Dessa forma, para estudarmos a HD da classe VLDS através desse ansatz, primeiro precisamos desenvolver essa conexão entre os parâmetros dele e os da equação da classe.

#### 5.1.1 Conexão entre os parâmetros não-universais da equação e os mensuráveis da superfície

Para explorarmos a forma da distribuição  $\chi$ , precisamos do parâmetro  $\Gamma$ , isso porque, como dito em Sec. 2.6, o crescimento ser conservativo garante  $v_\infty = 1$ . Já a covariância espacial exige o parâmetro  $A$ . Assim, primeiro precisamos conectar esses parâmetros aos da equação VLDS. Vamos obter essa relação entre os parâmetros seguindo de perto a análise de

## 5.1 Universalidade e subdivisão da classe VLDS



escala feita em [138,139]. Essa análise é feita considerando apenas as unidades das grandezas presentes na equação

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \lambda_4 \nabla^2 (\nabla h)^2 + \nu_4 \nabla^4 h + \sqrt{D} \zeta \quad \Rightarrow \quad \frac{[h]}{[t]} = [\nu_4] \frac{[h]}{[x]^4} + [\lambda_4] \frac{[h]^2}{[x]^4} + \sqrt{\frac{[D]}{[x][t]}} \quad (5.1)$$

onde  $[y]$  denota a unidade da grandeza  $y$ , a última parcela é consequência de  $[\delta(x)] = 1/[x]$  e  $[\delta(t)] = 1/[t]$ . Essa análise dimensional nos permite obter as unidades dos coeficientes da equação

$$[\nu_4] = \frac{[x]^4}{[t]} \quad ; \quad [\lambda_4] = \frac{[x]^4}{[t][h]} \quad \text{e} \quad [D] = \frac{[h]^2[x]}{[t]} \quad . \quad (5.2)$$

Dessas equações, fica evidente que podemos escrever a equação da classe VLDS na forma adimensional fazendo as transformações  $h' = (\lambda_4/\nu_4) h$ ,  $t' = ((D\lambda_4^2)^{4/3}/\nu_4^3) t$  e  $x' = ((D\lambda_4^2)^{1/3}/\nu_4) x$ . Essas transformações levam a equação para:

$$\frac{\partial h'}{\partial t'} = \nabla'^4 h' + \nabla'^2 (\nabla' h')^2 + \zeta(x', t') \quad . \quad (5.3)$$

Nessa forma adimensional, a escala de FV toma a forma  $w'_2 = L'^{2\alpha} f(t'/L'^z)$ . Que transformada de volta se torna

$$w_2 = AL^{2\alpha} f[(\zeta(t)/L)^z] \quad (5.4)$$

onde  $A = (D/\lambda_4)^{2/3} [\nu_4^3/(\lambda_4^2 D)]^{2\delta/(4-d)}$  e o comprimento de correlação  $\xi(t) = (Dt/A)^{1/z}$ . Esses resultados foram obtidos considerando a presença de uma correção qualquer nos expoentes, ou seja,  $\alpha = (4-d)/3 - \delta$ ,  $z = (8+d)/3 - 2\delta$  e  $\beta = (4-d-3\delta)/(8+d-6\delta)$ . Como já dito, o cálculo de renormalização com dois loops retorna  $\delta = 0,01361(2-d/2)^2$  [55].

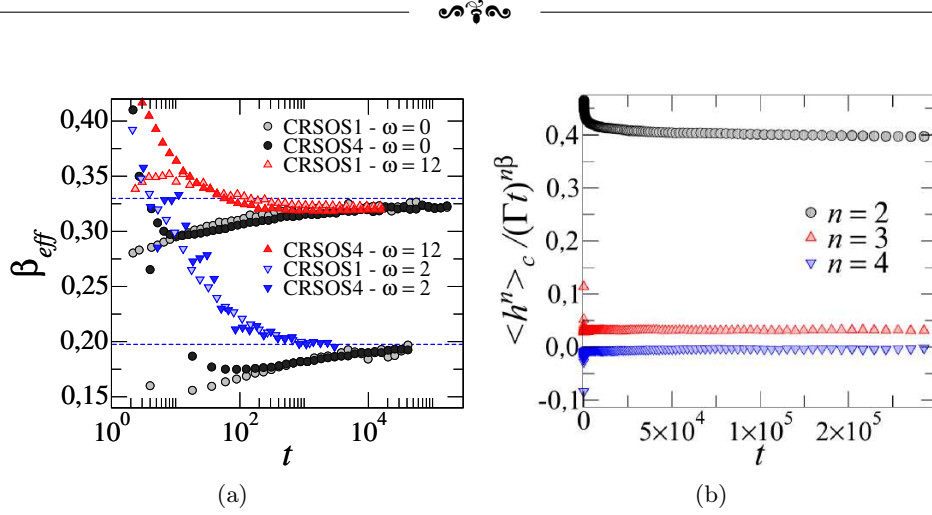
Para obtermos o  $\Gamma$  em função dos parâmetros da equação, basta relacionar a variância do ansatz com a escala de FV no regime de crescimento. Nesse regime  $f(x) \simeq bx^{2\beta}$  fazendo com que  $w_2 = (DA)^{\frac{1}{2\beta}-1} t^{2\beta} b$ , sendo a variância do ansatz  $\langle h^2 \rangle_c = (\Gamma t)^{2\beta} \langle \chi^2 \rangle_c$  notamos que  $\Gamma = DA^{\frac{1}{2\beta}-1}$  e  $b = \langle \chi^2 \rangle_c$ .

### 5.1.2 Distribuições de altura

Para estudar a classe VLDS, fizemos simulações dos modelos DT com um fator de redução de ruído  $N = 20$ , CRSOS com variações de altura  $m = 1$  (CRSOS1) e  $m = 4$  (CRSOS4), em  $d = 1$ . Em duas dimensões utilizamos o CRSOS com  $m = 1, 2$  e  $4$ . A estatística associada à geometria curva foi obtida usando o algoritmo para interfaces com lados crescentes, usando  $\omega = 12$  em uma dimensão e  $\omega = 1/2, 2$  em duas dimensões, sempre com  $\gamma = 1$ . Usamos expansões lentas para explorar tempos maiores, uma vez que na classe VLDS o comprimento de correlação cresce de modo lento, por  $z$  ser grande. Nos substratos de tamanho fixo usamos  $L = 131072$  e  $L = 2048$  em  $d = 1$  e  $2$  respectivamente. Como veremos a seguir, o modelo CRSOS1 foi essencial nesse trabalho pelo fato dos parâmetros não-universais da equação terem sido obtidos analiticamente em [140,141]. Eles obtiveram  $\nu_4 = (21 - 12\sqrt{2})/2$ ,  $\lambda_4 = (10 - 3\sqrt{2})/2$  e  $D = (2\sqrt{2} - 1)/2$ . Usando as relações obtidas na subseção passada obtemos  $\Gamma = 0,6167$  e  $A = 0,4662$ . Note que, apesar do CRSOS com diferentes valores de  $m$  ser essencialmente o mesmo modelo, cada valor desse parâmetro produzirá diferentes  $\Gamma$  e  $A$  e, assim, variar o  $m$  é equivalente a variar os parâmetros  $\nu_4$ ,  $\lambda_4$  e  $D$  da equação VLDS. Apresentaremos resultados de outros modelos VLDS no final desta seção.

Antes de discutirmos as distribuições de altura, é importante verificar se os expoentes

## 5.1 Universalidade e subdivisão da classe VLDS



**Figura 5.1:** (a) Expoente efetivo da rugosidade no tempo para uma (acima) e duas (abaixo) dimensões. (b) Cumulantes da distribuição  $\chi$  do modelo CRSOS1 em uma dimensão em interfaces de tamanho lateral fixo.

**Tabela 5.1:** Estimativa dos cumulantes de  $\chi$  do modelo CRSOS1 em  $d = 1 + 1$ .

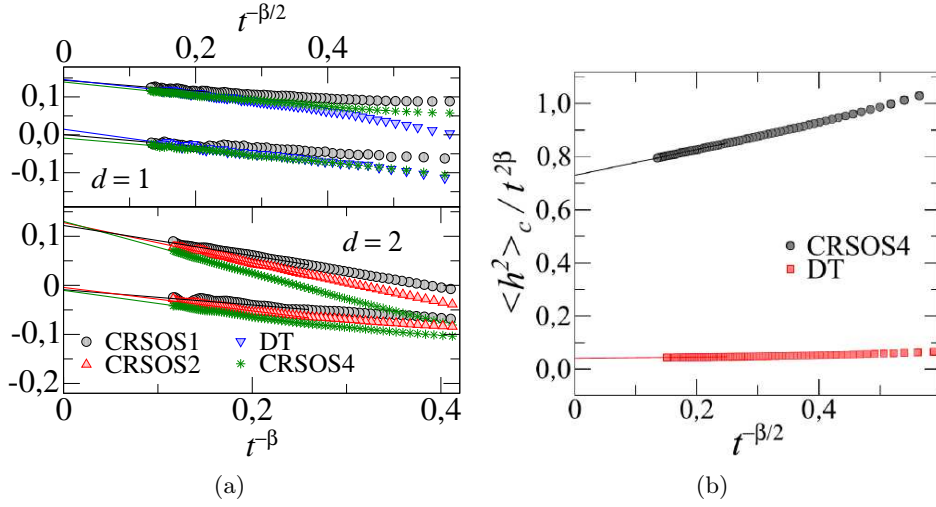
CI	$\langle \chi \rangle$	$\langle \chi^2 \rangle_c$	$\langle \chi^3 \rangle_c$	$\langle \chi^4 \rangle_c$
plano	0	0,375(5)	0,0315(5)	0,000(2)
curvo	0	0,612(8)	0,0487(3)	0,001(3)

são alterados pelo algoritmo de crescimento lateral. Os expoentes  $\alpha$  e  $z$  serão considerados adiante quando discutirmos as covariâncias. A Fig. 5.1(a) apresenta o expoente efetivo da rugosidade em função do tempo para os diferentes modelos e CI's em  $d = 1$  e  $d = 2$ . Em trabalhos anteriores [55,56] foi observado que a correção de dois loops é importante (em  $d = 1$ ), por isso comparamos os nossos resultados com os expoentes de dois loops, linhas azuis tracejadas. Nessa figura, notamos que  $\beta$  se aproximam bastante desses valores, assim, o crescimento do substrato não altera o seu valor assintótico. No entanto, podemos ver um leve desvio mesmo em tempos longos. Isso sugere a presença de fortes correções na escala da rugosidade, como consideraremos adiante.

Passando às distribuições de altura, como possuímos o valor de  $\Gamma$  do modelo CRSOS1, podemos isolar os cumulantes de  $\chi$  do ansatz. A Fig. 5.1(b) apresenta  $\langle \chi^2 \rangle_c$ ,  $\langle \chi^3 \rangle_c$  e  $\langle \chi^4 \rangle_c$ , lembrando que  $\langle \chi \rangle_c = 0$ , pois o crescimento é conservativo. Nessa figura notamos que esses cumulantes se tornam aproximadamente constantes, o que significa que o ansatz proposto funciona bem para a classe VLDS. No entanto, podemos notar que a variância decresce mais lentamente no tempo, esse decrescimento é consistente com  $\langle \chi^2 \rangle_c + ct^{-\beta/2}$ . Assim podemos supor que  $h = t + (\Gamma t)^\beta \chi + \mu t^\epsilon$ , com  $\langle \mu \rangle = 0$ , novamente pelo crescimento ser conservativo. A variância desse ansatz com a correção ( $\mu t^\epsilon$ ) será dada por  $\langle h^2 \rangle_c = (\Gamma t)^{1\beta} \langle \chi^2 \rangle_c + (\Gamma t)^\beta t^\epsilon \langle \chi \mu \rangle_{cov} + \langle \mu^2 \rangle_c t^{2\epsilon}$ . Dessa forma, tomando novamente que o decrescimento de  $\langle h^2 \rangle_c / (\Gamma t)^{2\beta} \simeq \langle \chi^2 \rangle_c + ct^{\beta/2}$ , temos  $\epsilon = 3\beta/4$  se a correção vier de  $\langle \mu^2 \rangle_c$  ou  $\epsilon = \beta/2$ , caso a correção seja fruto da covariância  $\langle \chi \mu \rangle_{cov}$ .

A estimativa dos cumulantes da distribuição de  $\chi$  para o modelo CRSOS1 se encontram na Tabela 5.1. Nela, vemos que os valores da variância são os que mais diferenciam a CI, além de uma leve diferença no  $\langle \chi^3 \rangle_c$ , sendo  $\langle \chi^4 \rangle_c$  bem próximo de zero em ambos os casos.

## 5.1 Universalidade e subdivisão da classe VLDS



**Figura 5.2:** (a) Skewness e Kurtosis em  $d = 1$  e  $d = 2$  dos diferentes modelos com substratos de tamanho fixo. No painel superior apresentamos os resultados para  $d = 1$  em função de  $t^{-\beta/2}$ , e no inferior  $d = 2$  em função de  $t^{-\beta}$ . (b) Gráfico utilizado para estimar o  $\Gamma$  do modelo CRSOS4 e do DT.

**Tabela 5.2:** Estimativas de  $S$ ,  $K$  e  $R$  dos diferentes modelos VLDS em  $d = 1$  (acima) e  $d = 2$  (abaixo). Os resultados para domínios crescentes em duas dimensões são para  $\omega = 1/2$ .

Modelo	CI plana		CI curva		
	$S$	$K$	$S$	$K$	$R_{CI}$
CRSOS1	0,137(8)	-0,002(8)	0,094(2)	0,001(5)	1,63(4)
CRSOS4	0,134(9)	-0,001(1)	0,090(2)	0,000(1)	1,62(5)
DT	0,136(8)	0,001(1)	0,093(4)	0,001(2)	1,69(6)
CRSOS1	0,13(2)	0,00(1)	0,066(7)	0,01(1)	2,26(4)
CRSOS2	0,13(1)	0,000(8)	0,065(6)	0,003(7)	2,27(5)
CRSOS4	0,13(2)	0,007(9)	0,062(8)	0,003(6)	2,28(4)

Note que até aqui não podemos afirmar que  $\chi$  é universal, por termos analisado um único modelo. Como não possuímos os valores de  $\Gamma$  para os demais modelos, olhamos para a *skewness* e a *kurtosis*, pois, ignorando as correções,  $S = \langle h^3 \rangle_c / \langle h^2 \rangle_c^{3/2} \simeq \langle \chi^3 \rangle_c / \langle \chi^2 \rangle_c^{3/2}$  e  $K = \langle h^4 \rangle_c / \langle h^2 \rangle_c^2 \simeq \langle \chi^4 \rangle_c / \langle \chi^2 \rangle_c^2$ . Assim, analisando essas razões de cumulantes, podemos verificar a universalidade da distribuição, que, de fato, é visível na Fig. 5.2(a), onde a extrapolação dessas razões de cumulantes retornam valores muito próximos para todos os modelos. Essas extrapolações foram feitas observando que correções do tipo  $t^{-\beta/2}$  ( $d = 1$ ) e  $t^{-\beta}$  ( $d = 2$ ) linearizavam razoavelmente as curvas em tempos longos. Nos casos crescentes, notamos que o dobro desses expoentes produziam as melhores extrapolações.

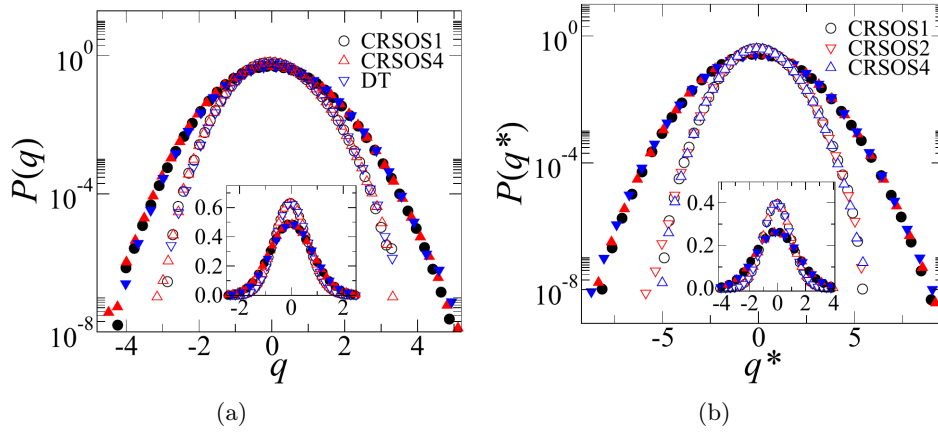
Os resultados dessas extrapolações em uma e duas dimensões para CI plana e CI curva são apresentadas na Tabela 5.2. Nesse caso, definimos uma nova razão  $R_{CI} = \langle h^2 \rangle_c^{CI_c} / \langle h^2 \rangle_c^{CI_p} \simeq \langle \chi^2 \rangle_c^{CI_c} / \langle \chi^2 \rangle_c^{CI_p}$  como sendo a razão da variância entre as subclasses curva e plana. Note que, como a  $\langle \chi \rangle = 0$ , o coeficiente de variação  $R$  utilizado no capítulo anterior fica indefinido. Na tabela 5.2 fica evidente que os resultados dos diferentes modelos concordam muito bem, confirmando a universalidade das distribuições de alturas. Notamos que, assim

## 5.1 Universalidade e subdivisão da classe VLDS



como na classe KPZ, as variâncias nos domínios crescentes são maiores que nos substratos de tamanho fixo, em ambas as dimensões. Além disso, como os valores da razão  $R_{CI}$  concorda entre os diferentes modelos, o valor de  $\Gamma$  deve ser independente da CI. É curioso que,  $S$  para substrato de tamanho fixo praticamente não muda de uma para duas dimensões, enquanto  $K$  é próxima de zero em todos os casos. É interessante notar também que os valores de  $S$  e  $K$  na classe VLDS são bem menores que aqueles da classe KPZ. No entanto, as razões de variância  $R_{CI}$  são maiores que  $R_{CI} = 1,27451$  ( $d = 1$ ) e  $R_{CI} \approx 1,46$  ( $d = 2$ ) da classe KPZ<sup>1</sup>. Os resultados da tabela também são menores que os obtidos para o estado estacionário,  $|S| \approx 0,32$  e  $|K| \approx 0,1$  em uma dimensão, e  $|S| \approx 0,2$  em duas dimensões [56,57]. Finalmente, existe uma estimativa de  $S$  feita através de renormalização com um loop no regime de crescimento, com resultado  $S = -0,0441$  [58], que inverte de sinal dependendo do sinal de  $\lambda_4$ , mas mesmo assim é bem menor que nossas estimativas.

Com base na concordância observada na tabela 5.2, podemos considerar que a distribuição de  $\chi$  é universal. Essa suposição nos permite utilizar os valores dos cumulantes obtidos para CRSOS1, tabela 5.1, para obter o valor de  $\Gamma$  dos modelos CRSOS4 e DT em uma dimensão. Para isso, plotamos na Fig. 5.2(b)  $\langle h^2 \rangle_c / t^{2\beta} \langle \chi^2 \rangle_c$  e extrapolamos para obter os valores  $\Gamma = 2,7(1)$  para CRSOS4 e  $\Gamma = 0,035(2)$  para DT.



**Figura 5.3:** Colapso das distribuições de altura reescaladas para a variável  $q$  em uma (a) e duas (b) dimensões. Em ambos os casos os símbolos cheios representam CI curva ( $\omega = 2$ ) e os símbolos vazados CI plana. Os gráficos internos estão em escala linear para evidenciar a concordância nos picos.

Possuindo os valores de  $\Gamma$  em uma dimensão, podemos fazer o colapso das distribuições  $P(\chi)$  através da variável  $q = (h - t)/(\Gamma t)^\beta$ . O colapso observado na Fig. 5.3(a) corrobora a universalidade das distribuições de altura da classe VLDS. Além disso, podemos concluir também que a estimativa dos  $\Gamma$ 's foi precisa e o colapso do caso crescente reforça o fato desse parâmetro ser independente da dinâmica lateral do sistema. Esses colapsos também podem ser verificados em duas dimensões. Nesse caso, como não conhecemos os valores dos  $\Gamma$ 's, definimos  $g_2 = \Gamma^{2\beta} \langle \chi^2 \rangle_c$  e fazemos  $q^* = (h - t)/\sqrt{g_2^f t^\beta}$ , que é simplesmente  $q/\sqrt{\langle \chi^2 \rangle_c^f}$ . Assim, temos a distribuição para CI plana com variância igual a um e para CI curva com variância igual a  $R_{CI}$ , isso é mostrado na Fig. 5.3(b).

<sup>1</sup>Em  $d = 1$  esse valor pode ser obtido diretamente de [9]. A estimativa no caso bidimensional pode ser feita usando  $\Gamma$  e  $\langle \chi_{CI,c}^2 \rangle_c$  de [16] e o  $g_2 = \Gamma^{2\beta} \langle \chi^2 \rangle_c$  obtido para o RSOS em CI plana de [142].

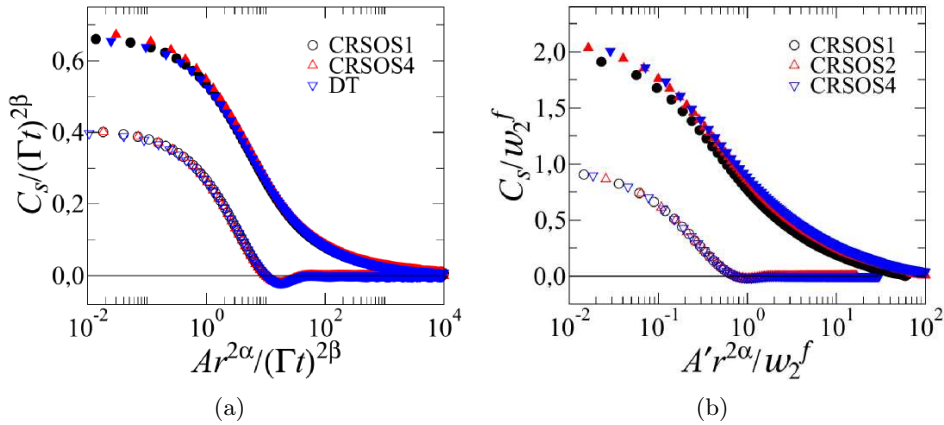


## 5.1 Universalidade e subdivisão da classe VLDS



### 5.1.3 Covariância espacial e temporal

Tendo em vista a universalidade das distribuições de altura, vamos analisar agora se o mesmo ocorre com as covariâncias. Basicamente, nosso interesse é saber se a função de escala  $\Psi$  na Eq. 2.34 é universal e dependente da CI. Porém, o colapso dessa curva depende do parâmetro  $A$ , que possuímos apenas para CRSOS1. Assim, de maneira análoga ao que fizemos na HD, traçamos a covariância espacial do modelo CRSOS1 e supondo que ela seja universal, verificamos se uma reescala apropriada no eixo  $x$  é suficiente para obter um colapso com os demais modelos. O parâmetro dessa reescala será o próprio  $A$ . Na Fig. 5.4(a) traçamos um gráfico com as covariâncias espaciais com CI plana (símbolos vazados) e CI curva (símbolos cheios). Estimamos o valor de  $A$  fazendo os mínimos presentes na CI plana concordarem. Obtemos  $A = 8,67(8)$  para o modelo CRSOS4 e  $A = 0,599(6)$  para o DT. Usando esses valores, plotamos as covariâncias espaciais dos sistemas com CI curva, também mostradas na Fig. 5.4(a). Verificamos que as curvas de fato colapsam, o que nos indica que a estimativa de  $A$  foi precisa. Desse gráfico podemos concluir que as funções  $\Psi$  da covariância espacial são universais e diferentes dependendo da CI.



**Figura 5.4:** (a) Covariâncias espaciais dos diferentes modelos com CI plana (símbolos vazados) e CI curva (símbolos cheios) em uma (a) e duas (b) dimensões.

Em duas dimensões o cenário é parecido. Como pode ser visto na Fig. 5.4, as curvas para uma dada CI têm qualitativamente a mesma forma em uma e duas dimensões. Neste caso, como não possuímos os valores dos parâmetros para nenhum dos modelos, reescalamos usando a rugosidade dos sistemas com substrato de tamanho fixo, assim  $C_s(0,t) = 1$  para substratos de tamanho fixo e  $C_s(0,t) = R$  no caso crescente. Na abscisa a reescala foi feita com um  $A'$  que translada os mínimos do caso plano para um. Assim, apesar da ausência dos parâmetros, podemos verificar que a covariância espacial também tem formas universais e dependentes das CI's em duas dimensões. Notamos também que para domínios crescentes  $\Psi \sim x^{-1/2}$ , em ambas as dimensões, para  $x$  grande.

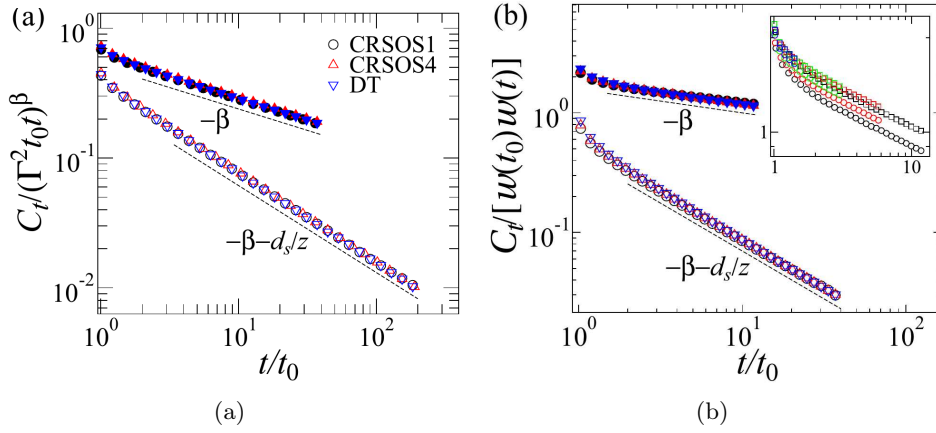
É muito importante destacar que, do ponto de vista da invariância de escala, os mínimos presentes na Fig. 5.4 para o caso plano são algo delicado. Um mínimo na covariância espacial está relacionado a um comprimento característico, e nessa escala de comprimentos o sistema necessariamente não é invariante de escala. Podemos criar uma intuição sobre esse mínimo notando que, nesse caso, como  $C_s = \langle (h(x) - \bar{h})(h(x+r) - \bar{h}) \rangle$ , uma parcela dos produtos é positiva enquanto a outra é negativa, e que a média disso ao longo da superfície é máxima. Assim notamos que  $r$  acaba sendo a distância média entre picos e vales. Ao contrá-

## 5.2 Universalidade e subdivisão das classes EW e MH



rio das superfícies realmente auto-afins, onde essa distância assume qualquer valor com igual probabilidade, esse mínimo na covariância espacial representa uma distância mais frequente entre os picos e os vales, o que significa que existe a formação de algo similar a "morros" na superfície. Isso já havia sido observado em modelos VLDS [118]. Finalmente, como o tamanho desses morros escala com a rugosidade, no limite hidrodinâmico esse comprimento característico diverge, o que significa que ele se torna menos relevante.

Como conhecemos a conexão entre os parâmetros  $A$  e  $\Gamma$  e os da equação VLDS, podemos estimar  $\lambda_4$  e  $D$  dos modelos CRSOS4 e DT, em  $d = 1$ . Como possuímos apenas dois parâmetros, precisamos desconsiderar a correção de dois loops. Dessa forma, fazendo  $\delta = 0$  temos  $\lambda_4 = \Gamma/A^{1/2\beta+1/2} \approx 0,03$  para CRSOS4 e  $\lambda_4 \approx 0,098$  para DT ( $N=20$ ). Independente da correção, obtemos  $D = \Gamma/A^{1/2\beta-1} \approx 0,89$  e  $D \approx 0,46$  para CRSOS4 e DT, respectivamente.



**Figura 5.5:** Covariâncias temporais dos diferentes modelos para CI plana (símbolos vazados) e CI curva (símbolos cheios) em uma (a) e duas (b) dimensões. O painel interior mostra como as curvas dos substratos crescentes sofre fortes correções. Assim, nesse caso as curvas no painel principal são as extrapolações para  $t_0 \rightarrow \infty$ .

Vamos agora analisar a covariância temporal (Eq. 2.35). Novamente, queremos verificar se  $\Phi$  é universal. Para isso, fazemos o colapso da covariância traçando um gráfico de  $C_t/(\Gamma^2 t_0 t)^\beta$  por  $t/t_0$ , onde  $t_0$  é o tempo no qual o estado da superfície é salvo para ser comparado em um tempo posterior  $t$ . Como podemos ver na Fig. 5.5(a), em uma dimensão temos um colapso muito bom das curvas, o que demonstra a universalidade da covariância temporal. Para duas dimensões, como não conhecemos o parâmetro  $\Gamma$ , reescalamos utilizando o produto das rugosidades nos tempos  $t$  e  $t_0$ . Apesar do bom colapso dos dados para substratos de tamanho fixo, Fig. 5.5(b), para os domínios crescentes esse colapso não ocorre, como podemos ver no painel interior. No entanto, realizando uma extrapolação em  $t_0$ , o que seria análogo a considerar  $t_0 \rightarrow \infty$ , as curvas passam a colapsar muito bem. A necessidade dessa extrapolação deve vir das correções mais fortes que aparecem para CI curva, lembramos que as correções na variância para CI curva têm um expoente duas vezes maior que na CI plana. Finalmente, tanto em uma quanto em duas dimensões, nós observamos que para CI curva em tempos longos,  $\Phi \sim t^{-\beta}$ , e para CI plana,  $\Phi \sim t^{-\beta-d/z}$ , que correspondem às conjecturas propostas nas referências [82] e [83], respectivamente. Assim, estamos mostrando que essas conjecturas realmente valem para a classe VLDS.

## 5.2 Universalidade e subdivisão das classes EW e MH

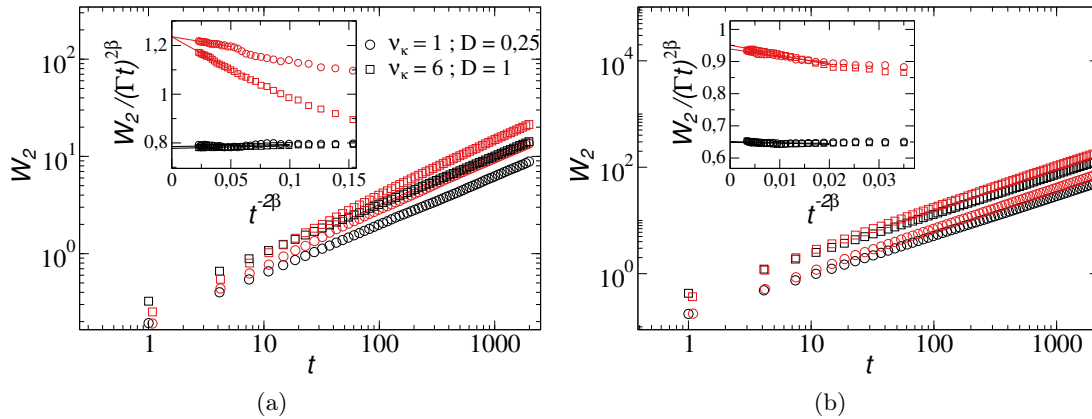
Nesta seção vamos fazer uma análise análoga a que foi feita para a classe VLDS nas classes EW e MH. Primeiramente devemos encontrar a conexão entre os parâmetros  $\Gamma$  e  $A$  e os das equações. Usando novamente uma análise dimensional, obtemos  $\nu_\kappa = [x]^\kappa/[t]$ , onde  $\kappa = 2,4$  para EW e MH, respectivamente, e  $[D] = [h]^2[x]/[t]$  para ambas as classes. Essa análise nos mostra que o comprimento de correlação é dado por  $\xi = (\nu_\kappa t)^{1/z}$  para ambas as classes, o que é natural visto que essas equações possuem apenas um termo com derivada espacial, responsável pela propagação das correlações. Comparando a rugosidade quadrática no regime de crescimento com o ansatz obtemos:

$$\langle h^2 \rangle_c = w_2 = AL^{2\alpha} f[(\xi(t)/L)^z] = AL^{2\alpha} \langle \chi^2 \rangle_c \left[ \frac{(\nu_\kappa t)^{1/z}}{L} \right]^{2\beta z},$$

onde, de acordo com as reescalas de  $w_2'$  para  $w_2$ ,  $A = D/\nu_\kappa$  em ambas as classes. A substituição de  $\alpha = \beta z$  resulta em

$$w_2 = A(\nu_\kappa t)^{2\beta} \langle \chi^2 \rangle_c \Rightarrow \Gamma = A^{1/2\beta} \nu_\kappa.$$

Utilizando a forma de  $A$  nessa última equação resulta em  $\Gamma = D^2/\nu_2$  para EW e  $\Gamma = (D^4/\nu_4)^{1/3}$  para MH.



**Figura 5.6:** Rugosidade da integração da equação EW (a) e MH (b) usando os parâmetros  $\nu_\kappa = 1$  com  $D = 0,25$  (círculos) e  $\nu_\kappa = 6$  com  $D = 1$  (quadrados). As curvas com pontos pretos são para CI plana e as com pontos vermelhos são para CI curva. Os painéis internos mostram a reescala usada para obter  $\langle \chi^2 \rangle_c$ .

Para estudar essas duas classes utilizamos integrações numéricas das equações de crescimento junto a simulações de modelos discretos. Na classe EW utilizamos os modelos de Family e SS com evaporação (com  $p = 1/2$ ), e na MH o modelo LCM. Essas simulações foram feitas em uma dimensão para substratos de tamanho fixo e crescendo linearmente com  $\omega = 12$ . Nos sistemas com tamanho fixo usamos  $L = 131072$  ( $2^{17}$ ) para os modelos discretos e  $L = 8192$  ( $2^{13}$ ) nas integrações. Como ficará evidente a seguir, a lógica utilizada para lidar com a ausência dos parâmetros  $\Gamma$  e  $A$  dos modelos discretos de cada classe é a mesma que a usada na classe VLDS, onde comparamos os resultados dos modelos aos das integrações para obter esses parâmetros.

Para realizar as integrações, utilizamos dois conjuntos de parâmetros em ambas equa-

### 5.3 Modelos com ampla difusão



**Tabela 5.3:** Lado esquerdo acima, média de  $\langle \chi^2 \rangle_c$  obtido pela integração das equações EW e MH com os dois conjuntos de parâmetros considerados. Lado esquerdo abaixo, estimativa do parâmetro  $\Gamma$  dos modelos assumindo os valores de  $\langle \chi^2 \rangle_c$  das integrações. Lado direito, estimativa de  $A$  através do colapso da covariância espacial dos substratos com tamanho fixo. Estimativa dos demais parâmetros através das relações obtidas no começo dessa seção, usando os valores de  $\Gamma$  e  $A$  dos resultados para substrato de tamanho fixo.

	CI plana	CI curva		Family	SS	LCM
$\langle \chi^2 \rangle_{cEW}$	0,794(7)	1,226(9)	$A$	0,64(1)	1,00(2)	0,83(1)
$\langle \chi^2 \rangle_{cMH}$	0,650(2)	0,937(2)	$\nu_\kappa$	0,78(6)	1,00(5)	0,60(1)
$\Gamma_{Family}$	0,318(7)	0,332(8)	$D$	0,50(5)	1,00(7)	0,50(2)
$\Gamma_{SS}$	0,998(8)	1,04(2)				
$\Gamma_{LCM}$	0,469(2)	0,474(3)				

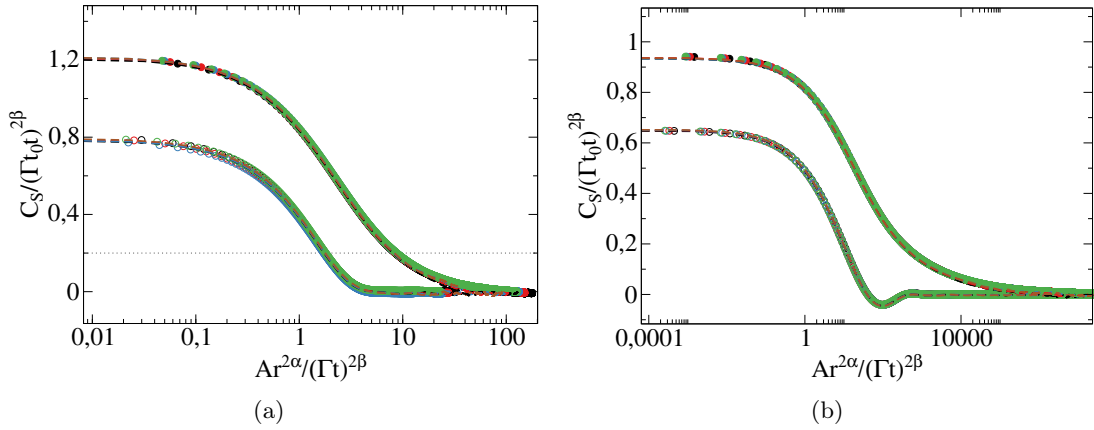
ções tanto com CI plana quanto com CI curva,  $\nu_\kappa = 1$  com  $D = 0,25$  e  $\nu_\kappa = 6$  com  $D = 1$ . As discretizações que utilizamos foram  $\nabla^2 h_i = h_{i+1} + h_{i-1} - 2h_i$  para EW e  $\nabla^4 h = h_{i+2} + h_{i-2} - 4h_{i+1} - 4h_{i-1} + 6h_i$  para MH.

Começando pela HD, como já comentamos na seção 2.6, no ansatz  $h = t + (\Gamma t)^\beta \chi$  o crescimento ser conservativo garante que  $\langle \chi \rangle = 0$ , e a HD ser Gaussiana implica em  $\langle \chi^n \rangle_c = 0$  para  $n > 2$ , o que nós realmente confirmamos para CI plana e CI curva. Sendo assim, devemos olhar apenas para a variância das distribuições. Analisando a rugosidade das superfícies obtidas pelas integrações das equações, observamos a subdivisão das distribuições, como mostrado na Fig. 5.6. Nessa figura fica evidente que a integração com dois conjuntos diferentes de parâmetros resulta numa mesma amplitude  $\langle \chi^2 \rangle_c$  para cada classe, e que esse valor muda se o substrato crescer ou não. Assumindo a universalidade dessas amplitudes, podemos obter o valor de  $\Gamma$  para cada modelo, tabela 5.3. Note que os valores desses parâmetros estimados para diferentes CI's é aproximadamente o mesmo, ficando evidente que a subdivisão das alturas é universal. Para o SS ( $p = 1/2$ ) os parâmetros  $\Gamma = 1$  e  $A = 1$  foram calculados na referência [143], que concorda com a nossa estimativa, reforçando a validade da nossa análise.

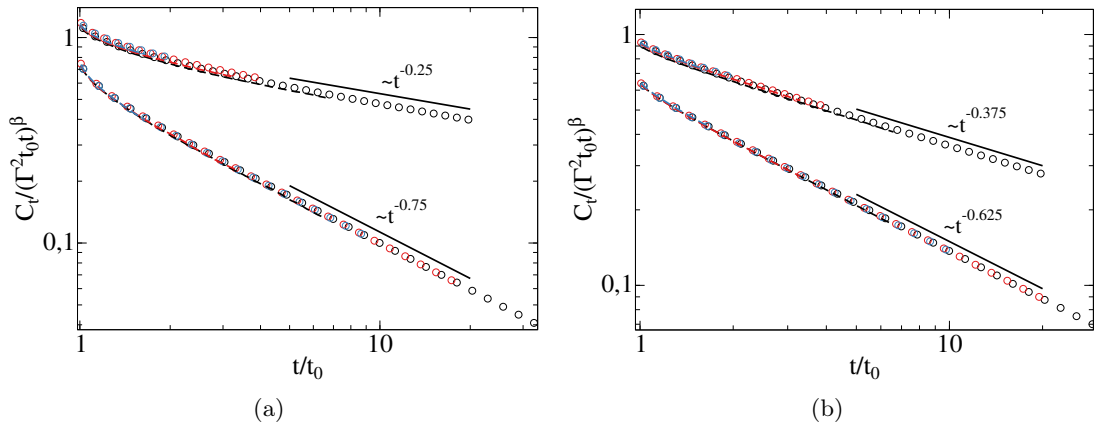
Sobre a covariância espacial, comparamos as curvas em diferentes tempos da integração com as dos modelos. Da mesma forma que fizemos para VLDS, obtivemos o valor de  $A$  igualando as curvas em um dado ponto de referência, para EW foi na linha pontilhada e MH utilizamos o mínimo novamente (ver Fig. 5.7). Utilizando esse valor de  $A$  obtido pela comparação entre as simulações com CI plana, Tab. 5.3, fizemos a reescala para CI curva e verificamos um ótimo colapso, o que demonstra a universalidade e a subdivisão da covariância espacial. Novamente, o valor de  $A$  estimado para o SS ( $p = 1/2$ ) concorda com o de [143].

Na covariância temporal, verificamos o colapso entre o resultado das integrações e os modelos discretos para diferentes tempos  $t_0$ , como mostrado na Fig. 5.8. O que, além de demonstrar a universalidade de  $\Phi$ , serve como mais uma evidência de que os  $\Gamma$ 's foram estimados com precisão razoável. Novamente, olhando para a escala de  $\Phi$  em tempos longos obtivemos que  $\Phi \sim t^{-\beta}$  e  $\Phi \sim t^{-\beta-d/z}$  para CI curva e CI plana, respectivamente, confirmando novamente as conjecturas de [82] e [83].

### 5.3 Modelos com ampla difusão



**Figura 5.7:** (a) Colapso da covariância espacial da integração EW (linhas tracejadas) com o modelo de Family (círculos). Símbolos vazados e símbolos cheios são para CI plana e CI curva, respectivamente. As cores representam diferentes tempos, sendo eles  $t = 0,5t_f, 0,7t_f, 0,9t_f$  e  $t_f$ , onde  $t_f$  é o tempo final da simulação. Nas integrações  $t_f = 2000$  ( $dt = 0,001$ ) e nos modelos  $t_f = 100000$  para CI plana e  $t_f = 20000$  para CI curva. (b) o mesmo para a comparação da integração da equação MH com o modelo LCM.



**Figura 5.8:** (a) Colapso da covariância temporal da integração da equação EW (linhas tracejadas) com o modelo de Family (círculos). As curvas de cima são para CI curva e as de baixo para CI plana. As cores representam diferentes  $t_0$ . Nas integrações os tempos são  $t_0 = 300, 600$  e  $1200$ , e nos modelos  $t_0 = 1000, 5000$  e  $10000$ . No gráfico (b) apresentamos o mesmo para integração da equação MH com o modelo LCM.

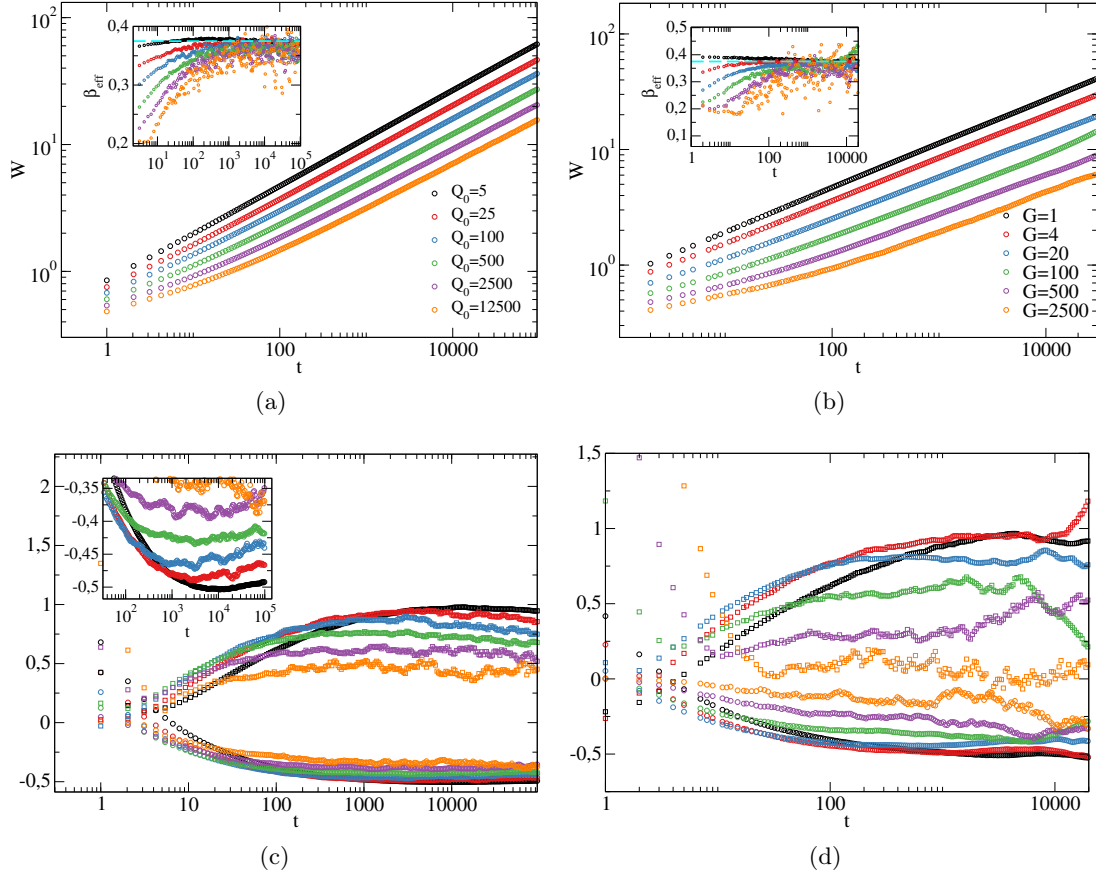
### 5.3 Modelos com longo comprimento de difusão

Nesta seção investigamos separadamente os modelos CV e LADP em  $d = 1$  e  $2$  em substratos de tamanho fixo,  $L = 65536$  ( $2^{16}$ ) e  $L = 1024$  ( $2^{10}$ ) respectivamente. Esses modelos possuem um comprimento de difusão que é de certa forma controlável, já que neles fixamos a priori um parâmetro relacionado a quantidade de saltos aleatórios que acontecem entre duas deposições. É evidente que, em última instância, a distância média percorrida pelos adátomos depende da morfologia da superfície. De qualquer forma, em ambos os modelos uma vasta gama de morfologias podem ser produzidas controlando esse parâmetro, de superfícies muito lisas quando esse parâmetro é grande a muito rugosas quando ele tende a zero.

### 5.3 Modelos com ampla difusão



É importante ressaltar que, em uma dimensão, esses modelos não devem pertencer à classe VLDS, pois ambos possuem  $\beta \approx 3/8$  (MH), como pode ser visto nas Figs. 5.9(a) e 5.9(b). No entanto, em seguida ficará claro porque tratamos esses modelos aqui, separados das discussões sobre a classe MH feitas na seção passada.

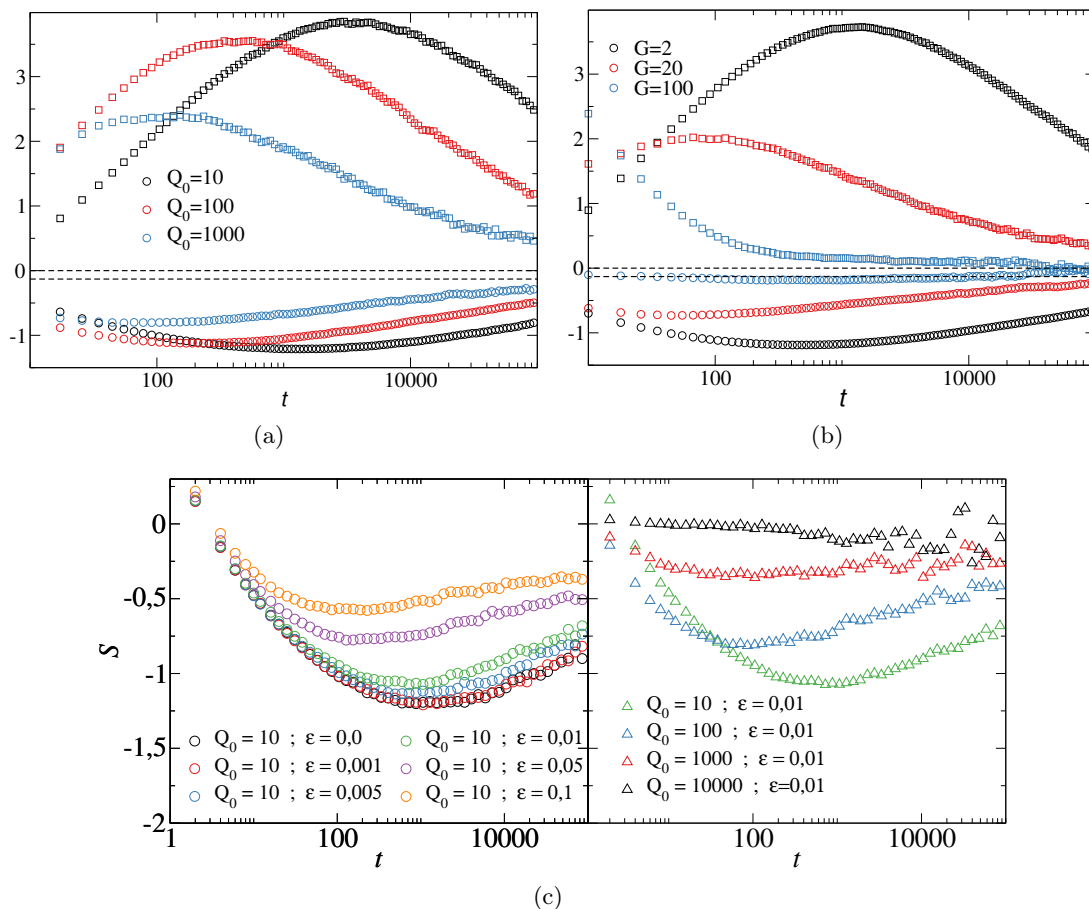


**Figura 5.9:** Rugosidade para diversos valores do parâmetro referente à difusão dos modelos CV (a) e LADP (b). Valores de  $S$  (círculos) e  $K$  (quadrados) para os mesmos valores de parâmetros dos modelos CV (c) e LADP (d). O painel interno de (c) é um zoom pra mostrar o mínimo em  $S$  que é evidente nos menores valores de  $Q_0$ . Todos os gráficos desta figura são resultados de simulações em  $d = 1$ .

Os valores de  $S$  e  $K$  do modelo CV com agregação irreversível (Fig. 5.9(c)) e do modelo LADP (Fig. 5.9(d)) variam razoavelmente de acordo com a mobilidade dos adátomos. Dentre os valores considerados em ambos os modelos, podemos verificar que a medida que a mobilidade aumenta, os valores de  $|S|$  e  $K$  se tornam menores. Assim, podemos assumir que eles pelo menos têm uma tendência de se aproximar de zero (lembrando que para a classe MH a HD deve ser uma Gaussiana) em grandes mobilidades, concordando com o esperado para a classe MH. Além disso, como podemos ver no painel interno da Fig. 5.9(c), a convergência de  $S$  é não monotônica e  $|S|$  diminui de forma muito lenta quando  $t \rightarrow \infty$ . A qualidade dos resultados do modelo LADP não nos permite excluir essa possibilidade. Dessa forma, esse *crossover* pode fazer esses resultados concordarem em tamanhos de sistemas e tempos de deposição muito longos, mas é claro que isso é apenas uma especulação.

Em duas dimensões o cenário é um pouco mais esclarecedor. Na Fig. 5.10 mostramos

### 5.3 Modelos com ampla difusão



**Figura 5.10:** Valores de  $S$  (círculos) e  $K$  (quadrados) para os modelos CV (a) e LADP (b). As linhas tracejadas são os valores  $S = -0,13$  e  $K = 0$  obtidos para a classe VLDS nesse capítulo. (c) Modelo de CV considerando a difusão de partículas com um vizinho lateral. Todos os gráficos desta figura são resultados de simulações em  $d = 2$ .

$S$  e  $K$  dos modelos CV e LADP. Neste caso os transientes são mais rápidos, os máximos e mínimos são bem evidentes. Além disso, para  $G = 100$  podemos ver as curvas do LADP se aproximando de zero, as demais curvas tem um formato que dá a entender que elas podem concordar com  $G = 100$  em tempos maiores que os estudados aqui. Os resultados do modelo CV são bem parecidos aos LADP, parecendo exigir mais tempo para se aproximar de zero. No entanto, se adicionamos a possibilidade de partículas com um vizinho difundirem no modelo CV o cenário se torna mais complexo. Por simplicidade podemos escolher diretamente um valor  $\epsilon = e^{-E_b/k_\beta T}$ , que de acordo com a definição do modelo, feita no Cap. no 3, a taxa de difusão de partículas com um vizinho lateral será  $Q_1 = Q_0\epsilon$ . Como veremos à frente, alguns dos valores de  $\epsilon$  que utilizamos são muito elevados. Fizemos isso porque queríamos verificar com clareza os efeitos da difusão de partículas com um vizinho. Na Fig. 5.10(c) colocamos dois painéis, do lado esquerdo fixamos  $Q_0$  e variamos  $\epsilon$ , do lado direito fixamos  $\epsilon$  e variamos  $Q_0$ . No painel esquerdo dessa figura, observamos que mesmo os valores pequenos de  $\epsilon$  se tornam relevantes a medida que o tempo cresce. Do lado direito, assim como pode ser visto na Fig. 5.10(a), observamos que  $Q_0$  é muito importante em tempos curtos. Além disso, a medida que  $\epsilon$  aumenta, vemos que os valores de  $S$  parecem convergir para platôs

em alturas diferentes, pelo menos para  $\epsilon = 0,05$  e  $0,1$  (painel esquerdo) isso parece claro. De fato, pensando na evolução da rugosidade, em tempos longos a difusão das partículas com um ou mais vizinhos deve se tornar relevante, pois, por causa da rugosidade elevada, a superfície possui diversos sítios com um ou mais vizinhos laterais que capturam rapidamente os adátomos em difusão. De acordo com esse raciocínio, a estatística assintótica da superfície deve depender do conjunto das taxas de difusão, incluindo as partículas com muitos vizinhos, dando um forte indício de que a distribuição de altura desse modelo pode não ser universal.

Pela discussão feita aqui, fica evidente que não podemos concluir muita coisa no momento sobre a universalidade da HD nesses modelos. Apesar do transiente ser mais claro em  $d = 2$ , os resultados apresentados permitem, no máximo, dizer que existe um forte indício que as HD's desses modelos não são universais. Portanto não exploramos ainda o efeito da CI, e nem investigamos as covariâncias.

## 5.4 Conclusão

Aplicando o algoritmo para produzir interfaces que crescem lateralmente, observamos uma subdivisão análoga à da classe KPZ nas demais classes. Notamos que as distribuições de alturas são universais, mas dependentes da CI. Para a classe VLDS, essa subdivisão foi evidenciada em uma e duas dimensões, enquanto em EW e MH nos limitamos à uma dimensão. Um detalhe que é interessante é que a rugosidade é sempre maior nos domínios crescentes, isso vale para todas as classes consideradas. Pensando no algoritmo de crescimento lateral, isso é de certa forma razoável, já que as duplicações acrescentam colunas que praticamente sempre tem alturas diferentes da altura média. Algo análogo a isso também deve acontecer em agregados realmente curvos.

Verificamos que as covariâncias espaciais e temporais também são universais e dependentes da CI nas demais classes. No caso da covariância espacial, notamos que o crescimento lateral do substrato inibe a formação de morros, como pode ser visto em 5.4 e 5.7(b). Nas covariâncias temporais, vimos que as conjecturas de Kallabis e Krug [82] (CI plana) e de Singha [83] (CI curva), associadas a lei de potência do decaimento temporal, de fato se aplicam a todas as classes consideradas. Além disso, notamos que a amplitude das covariâncias espaciais e temporais são sempre maiores nos domínios crescentes. Na covariância espacial esse aumento é de certa forma óbvio, além do algoritmo de crescimento lateral acrescentar colunas completamente correlacionadas com a sua vizinhança, a inflação lateral aumenta a distância entre duas dadas colunas sem alterar a amplitude do produto  $\langle (h(x) - \bar{h})(h(x+r) - \bar{h}) \rangle$ , o que deve se traduzir em um decréscimo mais lento da amplitude das correlações como função de  $r$ .

Verificamos que os modelos mais difusivos LADP e CV possuem uma HD que variam de acordo com a amplitude das difusões, impossibilitando a discussão sobre uma possível subdivisão causada pela CI

Os resultados referentes a classe VLDS (para os modelos CRSOS e DT) foram publicados em [144], enquanto os demais (para os modelos CV e LADP) ainda carecem de mais análises. Os resultados para as classes lineares (EW e MH) estão em fase de conclusão e devem ser submetidos em breve.



## Capítulo 6

# Distribuições de rugosidade e de extremos locais

Neste capítulo vamos explorar a universalidade da distribuição de rugosidade quadrática e de extremos (máximos e mínimos) locais para a classe KPZ. Primeiro vamos apresentar os resultados para a distribuição de rugosidade quadrática, que em inglês é conhecida por *squared local roughness distribution* (SLRD) e, depois, passaremos para as *local extremal height distributions* (LEHD's). Esse último termo se refere tanto à distribuição de máximos locais (MAHD), quanto à de mínimos locais (MIHD). Como ficará evidente, nessas distribuições locais a razão entre o comprimento de correlação ( $\xi$ ) e o tamanho da janela ( $l$ )  $\xi/l$  tem um papel fundamental, separando os diferentes regimes. Vamos começar explorando a universalidade da forma estacionária ( $\xi \gg l$ ) da SLRD<sup>1</sup>. Em seguida, vamos estudar a forma dessa distribuição quando  $\xi \lll l$ . Por último, vamos investigar a escala dos cumulantes no regime intermediário  $1 \ll \xi \ll l$ . Concluindo a discussão sobre a SLRD, passaremos aos resultados para as LEHD nos diferentes regimes. Nosso objetivo inicial era investigar a influência da CI nessas distribuições, procurando por uma subdivisão análoga a observada na HD. Ao longo desse estudo, analisamos em detalhes os diferentes regimes e encontramos resultados interessantes que vão além da motivação inicial.

### 6.1 Distribuições de rugosidade quadrática local

Como vimos no final da seção 2.6, a rugosidade quadrática calculada em uma janela na posição  $i$  e de tamanho  $l$  é dada por  $w_i^2 = \bar{h}^2 - \bar{h}^2$ . Para estudar a SLRD, utilizamos simulações com tamanhos de substrato fixo e crescentes, com  $\omega = 20$  em uma e  $\omega = 4$  em duas dimensões. Nos sistemas de tamanho fixo utilizamos  $L = 2^{17}$  ( $d = 1$ ) e  $L = 2^{11}$  ( $d = 2$ ). Executamos também simulações do modelo de Eden em  $d = 1$ , como descrito na seção 3.1.

#### 6.1.1 SLRD para $\xi \gg l$

Começando pelo regime estacionário (onde  $\xi \gg l$ ) que é o mais explorado na literatura, para acessar a forma da SLRD desenvolvemos uma abordagem diferente da normalmente implementada [8,20,22,86,145]. Para se obter um  $\xi$  realmente muito maior que  $l$  geralmente,

---

<sup>1</sup>Supondo que um observador esteja limitado a medir o sistema através de uma janela de tamanho  $l$ , como em medidas de AFM por exemplo, se  $\xi \gg l$  ele vai obter as propriedades do estado estacionário, mesmo se na realidade  $\xi \ll L$ .

## 6.1 Distribuições de rugosidade quadrática local

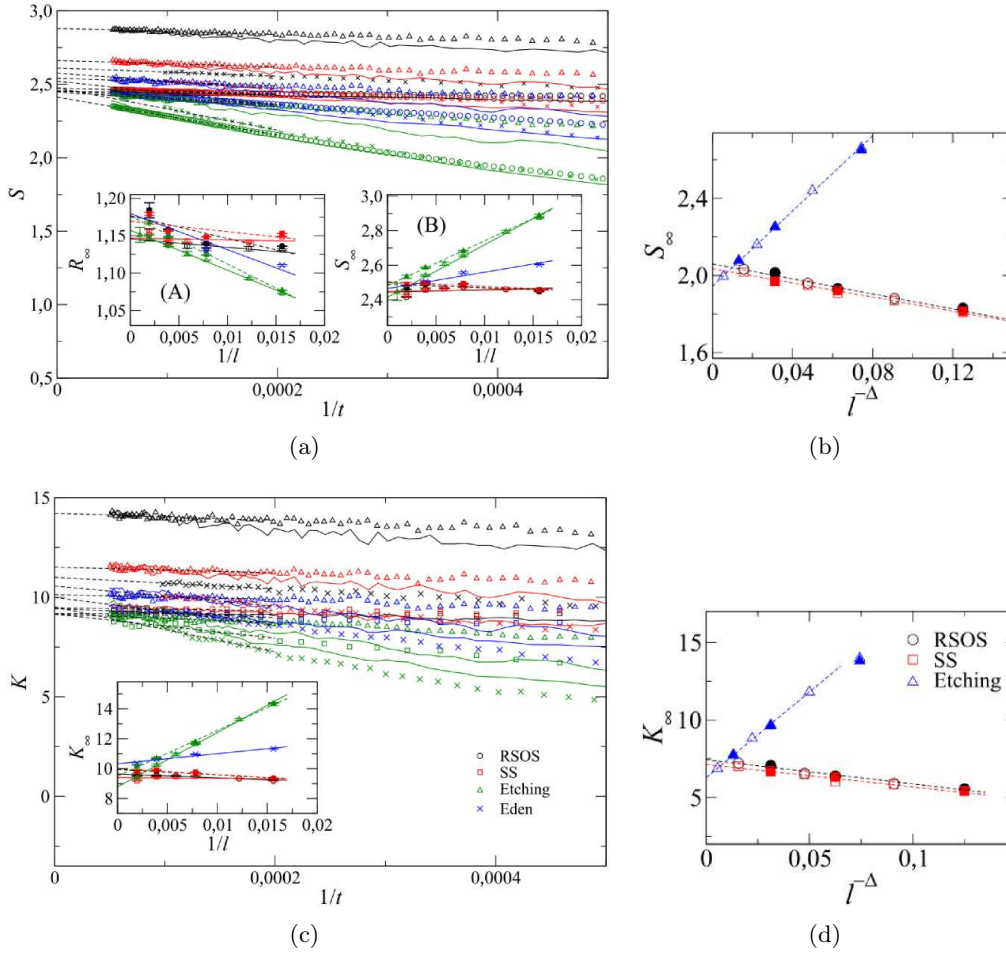


são necessários longos tempos de deposição em substratos muito grandes, o que é muito custoso numericamente e muitas vezes impraticável experimentalmente. Além disso, devido aos efeitos de tamanho finito, usa-se vários tamanhos de janela em busca de uma região de  $l$  onde a forma da distribuição não varia, isso é normalmente analisado tentando se obter um platô nas razões  $R$ ,  $S$  e  $K$  dos cumulantes da distribuição em função de  $l$ . A nossa abordagem contorna essas dificuldades com uso de duas extrapolações sucessivas. Primeiro fazemos uma extrapolação (de  $R$ ,  $S$  e  $K$  por exemplo) no tempo para acessar seus valores ( $R_\infty$ ,  $S_\infty$  e  $K_\infty$ ) no regime  $\xi \gg l$  usando dados para  $\xi \sim l$  apenas. Em seguida, fazemos uma extrapolação de  $R_\infty$ ,  $S_\infty$  e  $K_\infty$  para  $l \rightarrow \infty$  para eliminar os efeitos de tamanho finito. A Fig. 6.1 mostra a aplicação dessa abordagem. Nos painéis principais à esquerda temos a *skewness* e a *kurtosis* em função de  $1/t$  para diferentes modelos em uma dimensão. Note que, em alguns casos, as extrapolações (linhas tracejadas) retornam uma ampla margem de valores para  $S_\infty$  e  $K_\infty$ , que é o contrário do que se espera de uma grandeza universal. De fato, é importante notar que se olhássemos para apenas um tamanho de janela,  $l = 64$  por exemplo, poderíamos equivocadamente concluir que a distribuição não é universal, tendo uma forma diferente para cada modelo. Contudo, traçando um gráfico dos valores extrapolados em função de  $1/l$  (painéis internos), observamos que essas novas extrapolações passam a retornar um intervalo bem menor de valores. Notamos também que os modelos de Etching e Eden tem efeitos de tamanho finito mais fortes. No caso do modelo de Etching isso é esperado devido à sua alta rugosidade intrínseca  $\langle w_i^2 \rangle_c = 2,21(2)$ , estimada de acordo com [146]. Já no modelo de Eden esse efeito deve ser causado por alguma anisotropia residual imposta pela rede. Sendo assim, se excluirmos esses dois modelos da estimativa final das razões  $R$ ,  $S$  e  $K$ , obtemos os valores da tabela 6.1, incluindo os resultados em duas dimensões, obtidos das Figs. 6.1(b) e 6.1(d).

Comparando os resultados que obtivemos com os esperados teoricamente [102] em uma dimensão, e resultados anteriores [22,145] em duas dimensões, notamos que, apesar das barras de erro não englobarem os resultados prévios, eles estão bem próximos. Assim, notamos que as sucessivas extrapolações que propusemos permitem verificar a universalidade da SLDR mesmo com comprimentos de correlação que não satisfazem a condição  $\xi \gg l$ . De fato, para o modelo SS em duas dimensões o comprimento de correlação no tempo final  $t = 1000$  é  $\xi \approx 52$  ( $\xi = (\sqrt{A}|\lambda|t)^{1/z}$ ), e em uma dimensão no tempo  $t = 20000$  temos  $\xi \approx 737$ , enquanto obtivemos boas estimativas utilizando janelas de  $l \leq 512$  em uma dimensão e  $l \leq 64$  em duas dimensões. A título de comparação, o valor  $S = 2,04(4)$  obtido para o modelo RSOS em simulações com  $t = 1000$  se enquadra na margem encontrada para o mesmo modelo obtida em simulações com  $t = 13000$  ( $2,0 \leq S \leq 2,2$ ) em [145]. Finalmente, é importante notar que comprimentos de correlação muito longos podem ser inacessíveis, em experimentos ou em sistemas com  $z$  grande, onde a abordagem proposta aqui pode ser especialmente útil.

Como podemos ver na Fig. 6.1(a) e 6.1(c), desconsiderando a pequena diferença na convergência, a SLDR parece não depender do tamanho do substrato ser fixo ou crescer. Isso é de certa forma impressionante considerando a discussão do capítulo anterior, onde notamos que a amplitude a rugosidade depende da CI nas principais classes. Para deixar mais clara essa invariância, olhamos para a forma completa da distribuição, Fig. 6.2. Essas distribuições foram obtidas no tempo final das simulações utilizando os diferentes tamanhos de janela referidos na legenda da Fig. 6.1, ou seja, sem ser feita nenhuma extrapolação. Nesse gráfico temos o modelo de Eden representando os agregados genuinamente curvos, o SS com CI curva e os modelos RSOS e Etching com CI plana. Note como tanto em uma quanto em duas dimensões a CI parece não importar. Além disso, os resultados concordam com a curva teórica obtida por Antal et al. [102] para a classe EW em uma dimensão, que possui o mesmo

## 6.1 Distribuições de rugosidade quadrática local



**Figura 6.1:** *skewness* (a) e *kurtosis* (c) da SLRD em uma dimensão. Nos painéis principais temos  $S$  e  $K$  em função de  $1/t$  para diferentes modelos KPZ em  $d = 1$ , em condições CI plana (pontos) e CI curva (linhas sólidas). As diferentes cores representam diferentes tamanhos de janela  $l = 64$  (preto), 128 (vermelho), 256 (verde) e 512 (azul). As linhas tracejadas são extrapolações. Os painéis internos são os valores extrapolados no tempo como função de  $1/l$ , símbolos vazados são CI plana e os cheios CI curva. Em (b) e (d) os resultados das extrapolações em duas dimensões são mostrados como função de  $1/l^\Delta$ . O expoente  $\Delta$  da extrapolação é 1,0 para os modelos RSOS e SS e 1,25 para o Etching.

estado estacionário que a classe KPZ nessa dimensão.

### 6.1.2 SLRD para $\xi \lll l$

Nesse regime de comprimentos de correlação muito pequenos em relação ao tamanho de janela, foi mostrado em [102] que a distribuição para a classe EW é uma log-normal. No limite  $l \rightarrow \infty$  com  $\xi$  fixo (equivalente a  $t$  fixo) ou  $\xi \rightarrow 0$  com  $l$  fixo a distribuição tende para uma delta. A distribuição log-normal é dada por:

$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x x} \exp\left(-\frac{(\ln(x) - \mu)^2}{2\sigma_x^2}\right) \quad (6.1)$$

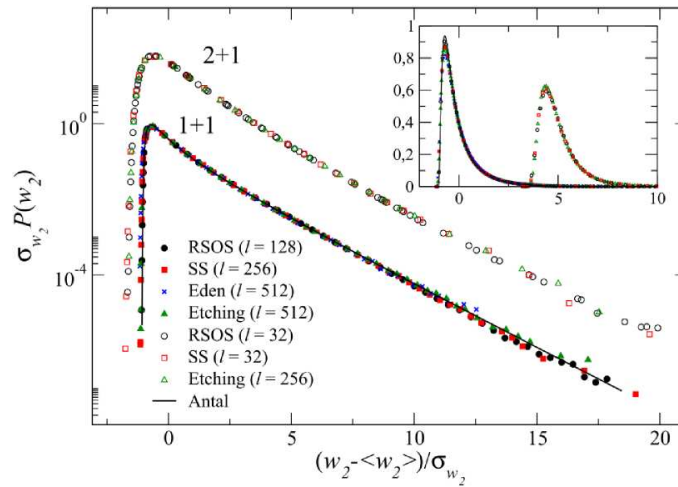
com  $x = w_2/\langle w_2 \rangle$ . Na Fig. 6.3(a) mostramos que isso também acontece para classe KPZ, onde apresentamos a SLRD do modelo SS em uma dimensão com tempo fixo  $t = 250$  e diversos

## 6.1 Distribuições de rugosidade quadrática local



**Tabela 6.1:** Comparação entre os valores de  $R$ ,  $S$  e  $K$  da SLRD estacionária para a classe KPZ obtidos aqui com valores encontrados na literatura. As interrogações são porque, apesar dos resultados serem numéricos, o autor não estima barras de erro.

	$R$	$S$	$K$
$d = 1$	1,15(2)	2,44(4)	9,5(4)
[102]	1,12	2,55	10,27
$d = 2$	2,05(5)	2,04(4)	7,3(3)
[22]	–	2,03(?)	7,11(?)
[145]	1,89(7)	2,1(1)	–

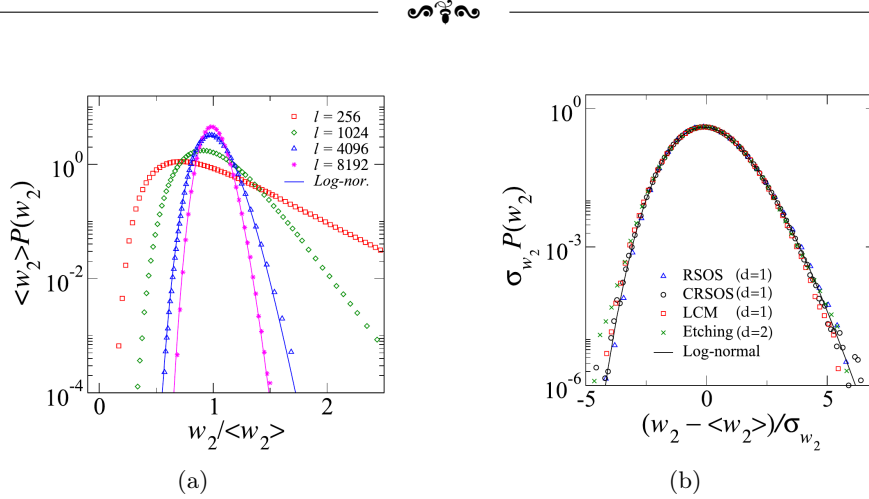


**Figura 6.2:** Forma da SLRD em uma e duas dimensões. No painel principal, a SLRD de  $d = 2$  foi transladada para cima em duas décadas. O painel interno apresenta os mesmos resultados em escala linear, com a SLRD  $d = 2$  transladada para média igual a cinco. Os resultados para os modelos Etching e RSOS são para CI plana e os do SS para CI curva.

tamanhos de janela. Nessa figura podemos ver a distribuição variando de algo parecido ao que se espera no regime assintótico para uma log-normal apenas mudando o tamanho da janela.

O leitor desatento pode achar que isso é natural pensando na discussão da seção passada, onde foi mostrado que a SLRD é a mesma para EW e KPZ. Todavia, estávamos falando da distribuição no estado estacionário, onde a não linearidade KPZ se torna irrelevante em uma dimensão. No regime que estamos discutindo agora, essas duas classes não tem relação alguma. Olhando para a SLRD de modelos de outras classes e em outras dimensões, notamos que essa distribuição sempre tende para uma log-normal nesse regime (ver Fig. 6.3(b)), o que significa que a classe e a dimensão do espaço devem ser irrelevantes nesse caso. Dessa forma, como estamos em um regime de pequenos comprimentos de correlação, a log-normal deve ser a distribuição de rugosidade de crescimentos totalmente aleatórios. Seguindo os cálculos de [102], no apêndice A desta tese demonstramos que a log-normal é realmente a distribuição de rugosidades de crescimentos aleatórios. De fato, é fácil imaginar que se temos um comprimento de correlação muito pequeno em relação ao tamanho da janela, através de uma renormalização podemos obter um conjunto de alturas descorrelacionadas, resultando em algo parecido com uma superfície totalmente aleatória. Por isso a classe de universalidade ou a

## 6.1 Distribuições de rugosidade quadrática local



**Figura 6.3:** (a) SLRD do modelo SS em uma dimensão com  $t = 250$  e diferentes tamanhos de janela. As duas linhas sólidas são ajustes feitos com log-normais. (b) SLRD de diferentes classes e dimensionalidades. Em uma dimensão, usamos  $t = 100$  e  $l = 2048$ , já em duas, utilizamos  $t = 25$  e  $l = 256$ .

dimensão do espaço se tornam irrelevantes nesse regime.

### 6.1.3 SLRD para $1 \ll \xi \ll l$

Nesse regime intermediário, vamos analisar como os cumulantes da SLRD escalam da log-normal para a distribuição do estado estacionário de  $\xi \gg l$ . A média dessa distribuição segue a relação de escala de Family-Vicsek. Podemos generalizar essa relação de escala para os demais cumulantes supondo algo como:

$$\langle w_2^n \rangle_c = l^{2n\alpha} f_n(t/l^z) \quad . \quad (6.2)$$

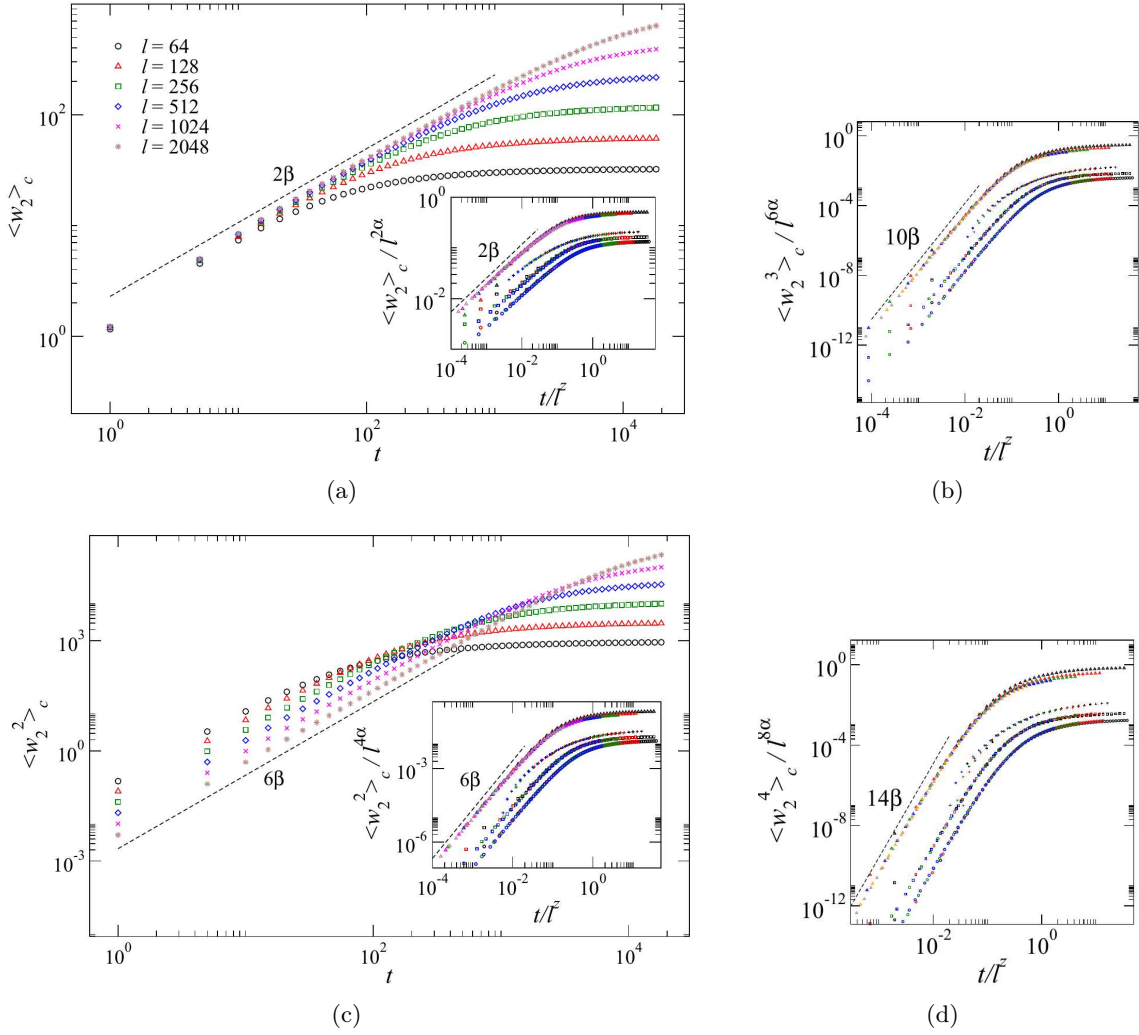
onde  $f_1(x) \sim x^{2\beta}$  se  $x \ll 1$  e  $f_1(x) \approx \text{const}$  quando  $x \gg 1$  de acordo com FV.

Como podemos ver nas Figuras 6.4 e 6.5, essa relação de escala funciona para as diferentes classes de universalidade em uma e duas dimensões. Entretanto, ao contrário da média, onde a função  $f_1$  escala de forma que a dependência em  $l$  se cancela, nos demais cumulantes isso não acontece, como podemos ver para o segundo cumulante na Fig. 6.4(c). Dessa forma, a função  $f_n(x)$  no regime  $x \ll 1$  não escala simplesmente como  $f_n(x) \sim x^{2\beta}$ , ao contrário do que poderia se esperar da relação de FV. A escala das diferentes classes e dimensões nesse regime indica algo como  $\langle w_2^n \rangle \sim l^{(1-n)d} t^{\gamma_n}$ , onde  $\gamma_n$  depende de  $\beta$  e  $\alpha$  (ou  $z$ ).

A origem dessa escala não trivial pode ser entendida através da classe RD. No apêndice A mostramos que nessa classe  $\langle w_2^n \rangle \sim l^{(1-n)d} t^{2n\beta}$ , que é a relação de escala que se esperaria inicialmente. Assim, a origem do  $\gamma_n \neq 2n\beta$  deve estar vinculada ao comprimento de correlação. Novamente no apêndice, ainda utilizando os resultados de [102], mostramos que para a classe EW em  $d = 1$ ,  $\langle w_2^n \rangle \sim l^{(1-n)} t^{n-1/2}$ . Sendo  $\beta = 1/4$  e  $z = 2$ , podemos reescrever  $\gamma_n = n - 2\beta = 2n\beta + (n - 1)/z$ , e lembrando que  $\xi \sim t^{1/z}$ , obtemos  $\langle w_2^n \rangle \sim (l/\xi(t))^{(1-n)} t^{2n\beta}$ . Dessa forma, fica evidente que a variável relevante é  $l_R = l/\xi$ , que é aproximadamente a razão de colunas descorrelacionadas contidas na janela de tamanho  $l$ .

Para o segundo cumulante da SLRD, a dependência com  $l_R$  pode ser entendida através do teorema central do limite (TCL). Como vimos, a janela de lado  $l$  tem cerca de  $l_R^d$  sítios descorrelacionados que são somados para produzir  $w_2$ , assim, de acordo com TCL, a variância de  $w_2$  deve ser da ordem de  $1/l_R^d$ . Note que no limite  $l_R^d \rightarrow \infty$  a distribuição tende a uma delta,

## 6.1 Distribuições de rugosidade quadrática local



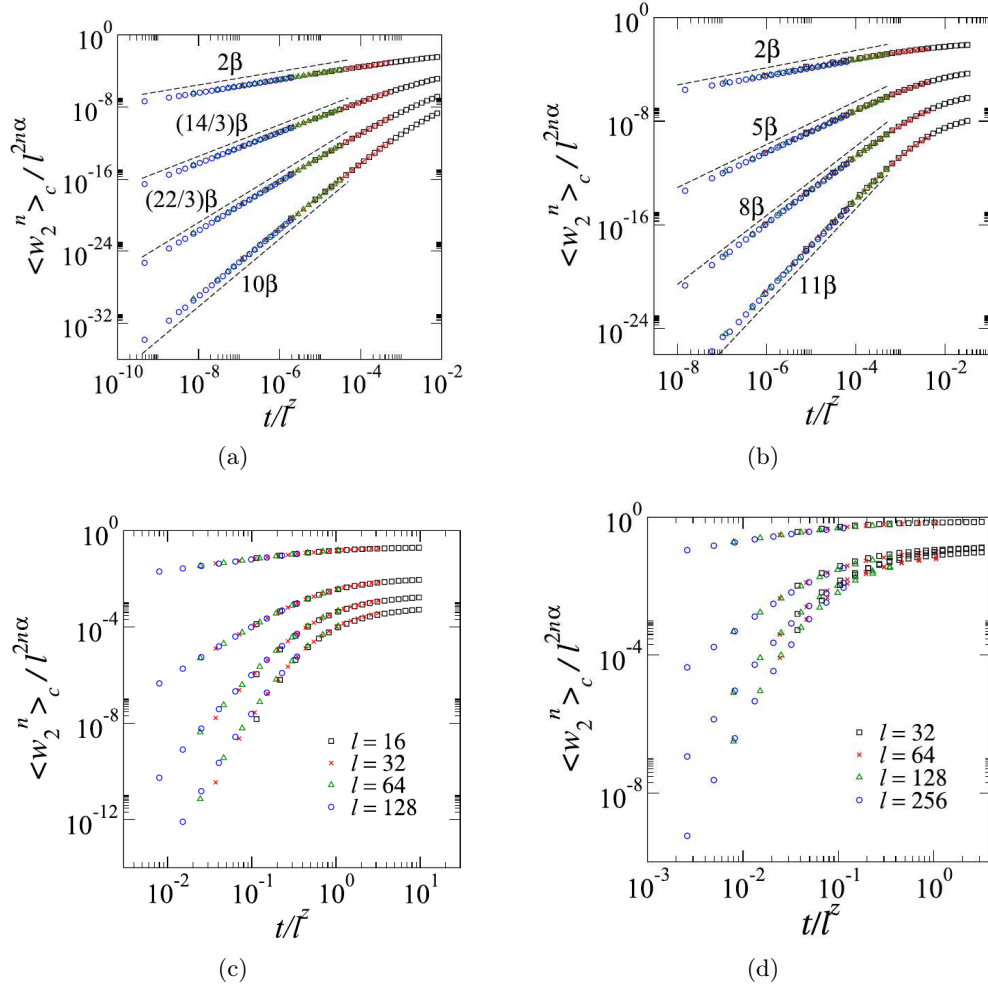
**Figura 6.4:** O painel principal de (a) e (c) contém a evolução temporal do primeiro e do segundo cumulante da SLRD do modelo de Etching, respectivamente. Nos painéis internos de (a) e (c), e em (b) e (d), apresentamos o colapso dos cumulantes da SLRD dos diferentes modelos. Utilizamos símbolos pequenos para as curvas não se misturarem. De cima para baixo temos as curvas do modelo de Etching (triângulos), Eden (cruzes), SS (quadrados) e RSOS (círculos). Todos os resultados dessa figura são para  $d = 1$ .

levando ao regime discutido da subseção passada. Sendo assim, no apêndice mostramos que a dependência do cumulante de ordem  $n$  da log-normal com  $l_R$  é dada por  $\langle x^n \rangle_c \sim l_R^{(1-n)d} t^{2n\beta}$ . Substituindo de volta  $l_R \sim l/t^{1/z}$  obtemos a relação de escala dos cumulantes de SLRD para todas as classes de universalidade em qualquer dimensão, sendo

$$\langle w_2^n \rangle_c \sim l^{(1-n)d} t^{\gamma_n} \quad \text{com} \quad \gamma_n = 2n\beta + \frac{(n-1)d}{z} = \left( 2n + \frac{(n-1)d}{\alpha} \right) \beta \quad . \quad (6.3)$$

O fato de  $\gamma_n$  depender de dois dos expoentes nos permite usar a escala de qualquer par de cumulantes da SLRD para obter o conjunto completo dos expoentes de escala. Além disso, o modelo LCM possui rugosidade anômala, onde  $\langle w_2 \rangle \sim l^{2\alpha_{loc}}$  com  $\alpha_{loc} \neq \alpha$ . No entanto, como pode ser visto na Fig. 6.5(a), a escala dos cumulantes da SLRD desse modelo

## 6.2 Distribuição de extremos locais



**Figura 6.5:** Colapso dos quatro primeiros cumulantes, de cima para baixo  $n = 1, 2, 3, 4$  respectivamente, da SLRD do modelo LCM (a) e CRSOS (b) em  $d = 1$ . Nos gráficos (c) e (d) apresentamos os resultados em  $d = 2$  do modelo RSOS e Etching nessa ordem. Neste caso, os colapsos foram feitos utilizando os expoentes  $\alpha = 0,3869$  [51] e  $z = 2 - \alpha$ . Os cumulantes seguem a mesma ordem de (a) e (b).

envolvem apenas o expoente  $\alpha$  da rugosidade global. Possibilitando contornar as dificuldades produzidas pela rugosidade anômala. Outra aplicação interessante da escala dos cumulantes da SLRD é na estimativa de  $z$ , pois, a determinação desse expoente depende de boas estimativas do comprimento de correlação ( $\xi \sim t^{1/z}$ ), que nem sempre é algo fácil. Assim, utilizar os cumulantes da SLRD é uma alternativa interessante para se classificar interfaces quando dificuldades práticas limitam as medidas que podem ser extraídas da superfície. Enfim, para verificar a viabilidade dessa alternativa, mostramos que os expoentes da classe KPZ podem ser obtidos de forma precisa através de 6.3, ver tabela 6.2. Para obter esses valores utilizamos  $\gamma_n^{eff}$  de inclinações sucessivas no gráfico de  $\ln \langle w_2^n \rangle_c \times \ln t$  e em seguida extrapolamos para  $l$  grande. Note que os resultados concordam bem com as estimativas mais recentes desses expoentes,  $\alpha = 0,3869(4)$ ,  $\beta = 0,2415(15)$  e  $z = 1,613$  [50,51].

## 6.2 Distribuição de extremos locais



**Tabela 6.2:** Estimativas dos expoentes universais através da Eq. 6.3 dos cumulantes da SLRD para a classe KPZ em  $d = 2$ . Aqui utilizamos  $\alpha = \gamma_1/(\gamma_2 - 2\gamma_1)$ ,  $\beta = \gamma_1/2$  e  $z = 2/(\gamma_2 - 2\gamma_1)$ .

Modelo	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\alpha$	$\beta$	$z$
RSOS	0,483(9)	2,189(5)	0,39(1)	0,242(5)	1,63(3)
SS	0,48(1)	2,20(1)	0,39(1)	0,240(5)	1,61(3)
Etching	0,47(1)	2,18(2)	0,38(2)	0,235(5)	1,61(4)

## 6.2 Distribuição de extremos locais

Nas subseções seguintes vamos apresentar os resultados para as distribuições de máximos (MAHD) e de mínimos (MIHD) locais. Essas distribuições estão intimamente ligadas à forma das caudas da HD, a MAHD referente à cauda direita e a MIHD à esquerda. Sendo assim, a diferença entre essas distribuições depende da Skewness. Além disso, para os modelos com excesso de velocidade negativa, a Skewness inverte de sinal e as caudas “trocam de lugar”. Por isso tratamos a MIHD dos modelos RSOS e SS como se fossem a MAHD e vice-versa. Como em  $d = 1$  a classe KPZ possui o mesmo estado estacionário que a classe EW, que tem HD simétrica, nessa dimensionalidade a MAHD e a MIHD são idênticas no regime  $\xi \gg l$ . Por isso é desnecessário especificar entre MIHD ou MAHD, sendo suficiente utilizar apenas o termo LEHD. Em duas dimensões isso não é verdade, onde a classe KPZ possui HD assimétrica mesmo no estado estacionário, neste caso tratamos separadamente a distribuição de máximos (MAHD) e a de mínimos (MIHD). Para dar sequência à discussão anterior, nesta seção vamos começar pelo regime  $1 \ll \xi \ll l$  e em seguida passaremos para o regime  $\xi \gg l$ .

### 6.2.1 LEHD para $1 \ll \xi \ll l$

Como a rugosidade está relacionada à amplitude das flutuações, é razoável que exista alguma relação entre ela e os extremos. Realmente, em [89] foi mostrado que a média da distribuição de máximos  $\langle M_{sat} \rangle \sim \langle w_{sat} \rangle \sim L^\alpha$ . Essa relação parece não funcionar na dimensão crítica superior, isso porque na classe EW, em  $d = 2$ ,  $\langle w_{sat} \rangle \sim \sqrt{\ln L}$  enquanto  $\langle M_{sat} \rangle \sim \ln L$  [93,94]. De qualquer forma, podemos propor uma relação de escala para a MAHD inspirada em FV

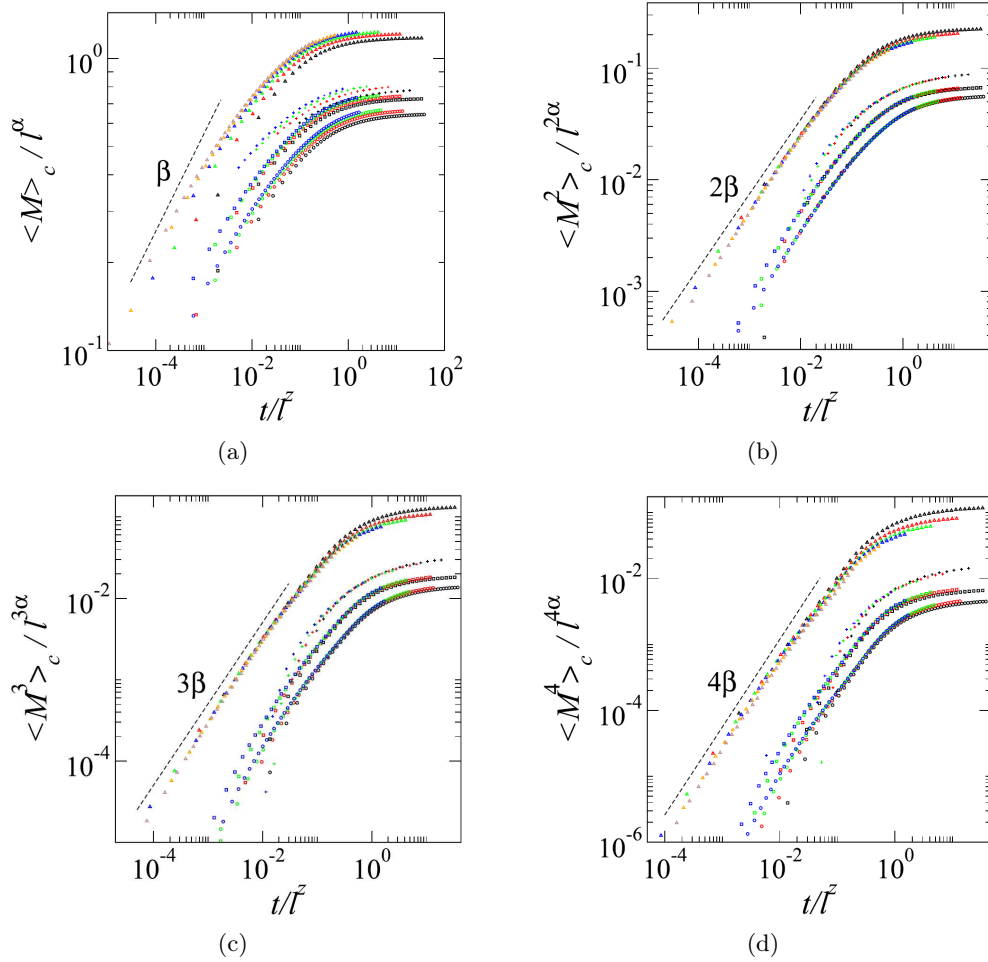
$$\langle M^n \rangle_c \sim l^{n\alpha} G_n(t/l^z) \quad , \quad (6.4)$$

onde  $G_n$  deve ser uma função de escala. Nos gráficos da Fig. 6.6 podemos verificar que essa relação proposta realmente funciona em uma dimensão. Na verdade, analisando atentamente a Fig. 6.6(a), notamos que no primeiro cumulante esse colapso não é muito bom, havendo uma sobreposição ligeiramente melhor apenas nos maiores tamanhos de janela. É de certa forma curioso a média apresentar o pior colapso, normalmente acontece o contrário, quanto maior a ordem do cumulante menos preciso o resultado. A origem para esse desvio são fortes correções na relação de escala proposta. Em [89], foi demonstrado que o máximo relativo deve escalar no tempo com  $\langle M \rangle \sim t^\beta [C + \ln L - (\beta/\alpha) \ln t]^{1/a}$ , onde  $a$  é o expoente de decaimento da cauda direita (esquerda caso  $\lambda < 0$ ) da distribuição e  $C$  é apenas uma constante. Provavelmente esses logaritmos aparecem apenas na média, explicando porque ela apresenta o pior colapso dentre os cumulantes analisados.

A Fig. 6.6 mostra que  $G_n(x) = \text{const}$  para  $x \gg 1$  e  $G_n(x) \sim x^{n\beta}$  para  $x \ll 1$ , que não funciona muito bem no primeiro cumulante por causa do logaritmo já discutido.



## 6.2 Distribuição de extremos locais

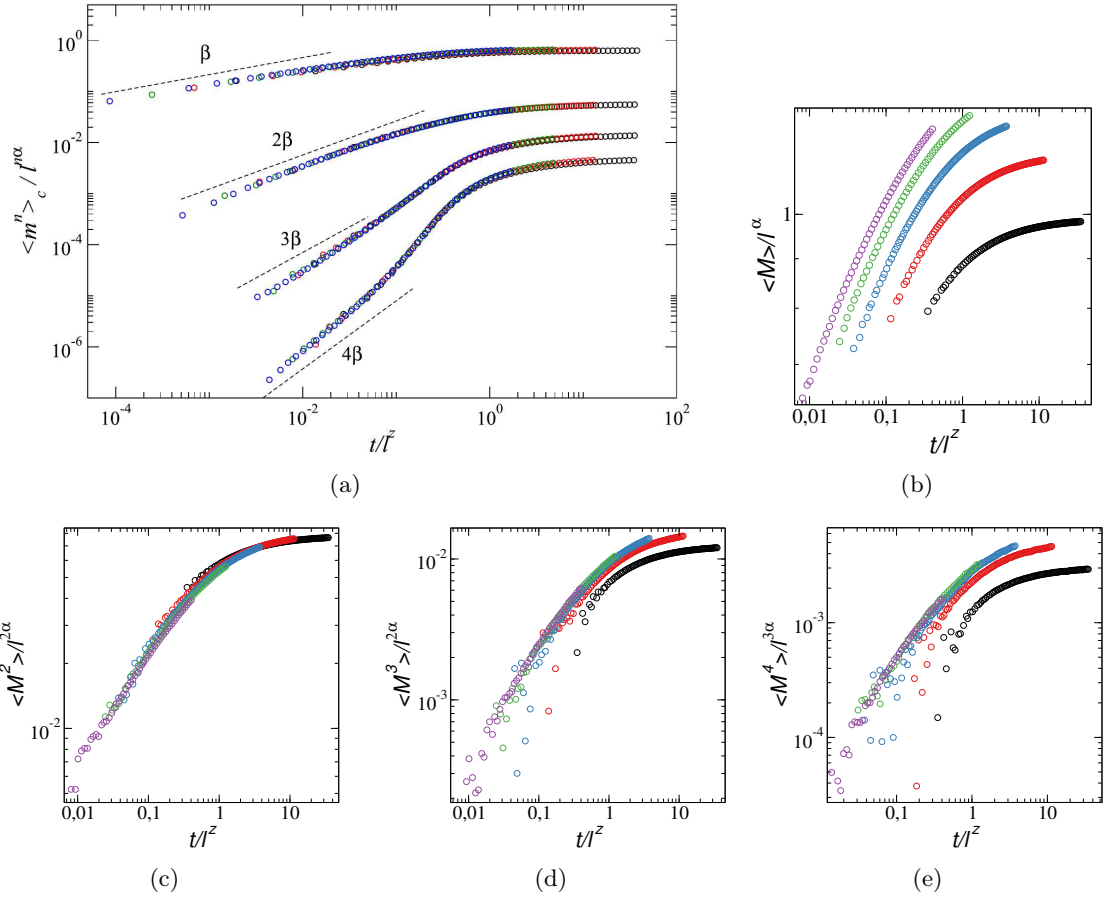


**Figura 6.6:** De (a) a (d) escala do primeiro ao quarto cumulante da distribuição de máximos locais em  $d = 1$  são mostradas. Utilizamos símbolos bem pequenos para as curvas não se misturarem, de cima para baixo são os modelos de Etching (triângulos), Eden (cruzes), SS (quadrados) e RSOS (círculos). As diferentes cores representam diferentes tamanhos de janela, sendo:  $l = 64$  (preto), 128 (vermelho), 256 (verde), 512 (azul), 1024 (laranja), 2048 (marrom).

Nessa mesma figura podemos notar que em tempos curtos os modelos SS e RSOS apresentam um desvio dessa lei de potência, a causa disso deve ser a limitação nas diferenças de alturas desses modelos, que produz superfícies muito lisas com extremos pouco acentuados em tempos curtos. Notamos também que as curvas do modelo de Eden apresentam um desvio ainda maior, demorando mais para se aproximar da lei de potência proposta. Sistemas curvos têm o problema adicional de serem pequenos em tempos curtos, o que deve ser a causa desse desvio mais acentuado. Como nenhum desses problemas se aplicam ao modelo de Etching, ele concorda com a lei de potência proposta desde tempos muito curtos.

Ao contrário do que encontramos para a SLRD, a escala dos cumulantes da MAHD são independentes de  $l$ , com expoentes que são simples múltiplos de  $\beta$ . Sendo assim, não podemos obter os demais expoentes apenas comparando a escala dos cumulantes dessa distribuição. Provavelmente a escala da MAHD é mais simples porque ela é resultado da flutuação de uma única coluna extrema por janela, não sendo uma média como na SLRD, por isso o teorema central do limite não se aplica e a escala é independente de  $l$ .

## 6.2 Distribuição de extremos locais



**Figura 6.7:** (a) Escala dos quatro primeiros cumulantes, de cima para baixo  $n = 1, 2, 3, 4$ , da MIHD do modelo RSOS em  $d = 1$  com janelas de tamanho  $l = 64$  (preto), 128 (vermelho), 256 (verde), 512 (azul). De (b) a (e) os quatro primeiros cumulantes da distribuição de máximos locais do mesmo modelo em  $d = 2$  são mostradas. Os tamanhos de janelas são  $l = 8$  (preto), 16 (vermelho), 32 (verde), 64 (azul), 128 (violeta).

Para a MIHD o cenário é um pouco mais complicado. Nesse caso propomos a mesma forma  $\langle m^n \rangle_c \sim l^{n\alpha} g_n(t/l^z)$ . Na Fig. 6.7(a) apresentamos os quatro primeiros cumulantes do RSOS em  $d = 1$ , onde podemos notar que  $g_3$  e  $g_4$  possuem um *crossover* no meio da região de escala, o resultado para os demais modelos é parecido. Assim,  $g_n(x) = \text{const}$  se  $x \gg 1$  e  $g_n(x) \sim t^{n\beta}$  se  $x \ll 1$  apenas para  $n \leq 2$ .

Em duas dimensões os cumulantes apresentam correções mais fortes ainda. Nas Figuras de 6.7(b) até 6.7(e) mostramos que  $\langle M^n \rangle_c$  das diferentes janelas não colapsam, apesar da distância entre as curvas começar a diminuir a medida que as janelas se tornam grandes. Assim como em uma dimensão, a correção nos cumulantes de ordem maior são mais fracas, mas mesmo assim o único cumulante que apresenta um colapso razoável é o segundo, com o terceiro e o quarto cumulante apresentando algum acordo apenas nas maiores janelas.

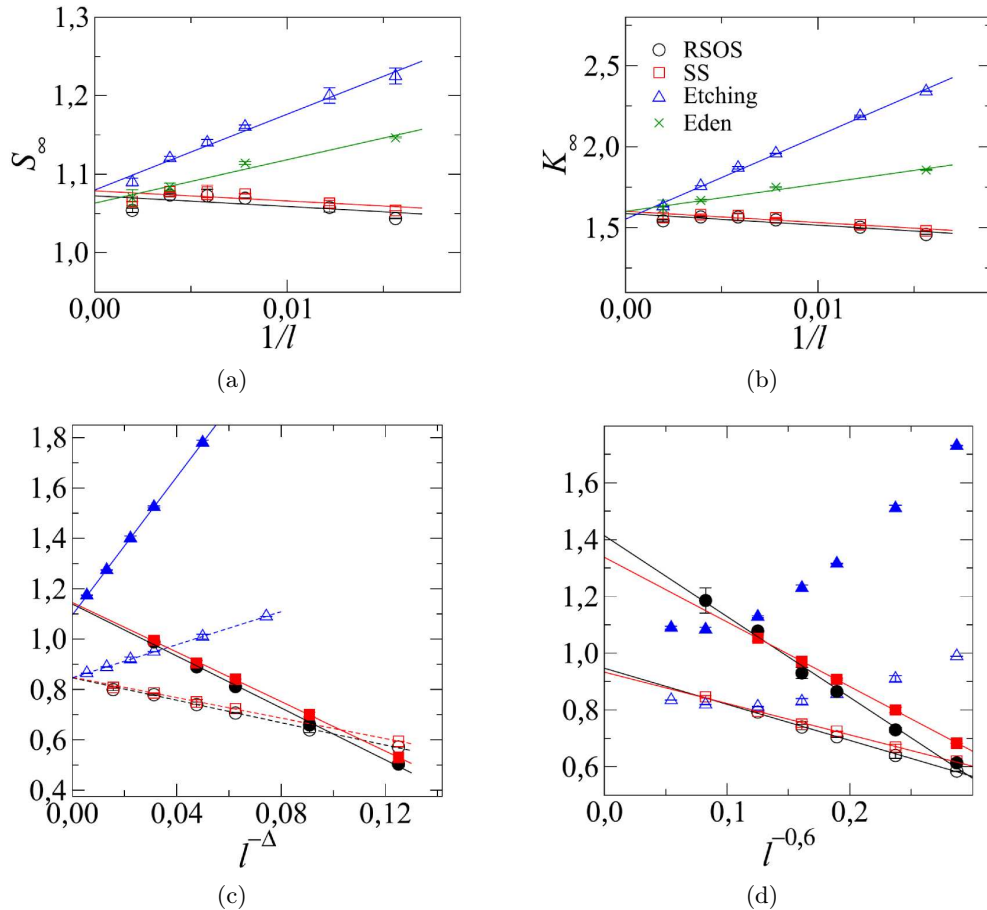
Com base nas discussões desta subseção, fica evidente que a evolução dos cumulantes das LEHD não representa uma ferramenta tão útil quanto os da SLRD. Embora seja interessante observar como os cumulantes dessas distribuições escalam, eles apresentam fortes correções e *crossovers*. Além disso, mesmo no melhor cenário, é possível obter apenas o expoente  $\beta$  através desses cumulantes.

## 6.2 Distribuição de extremos locais



### 6.2.2 LEHD para $\xi \gg l$

Para acessar a forma assintótica das LEHD's estacionárias, utilizamos a mesma abordagem apresentada na subseção 6.1.1. A janela de tempo estudada foi a mesma, logo toda a discussão sobre a obtenção dos resultados para  $\xi \sim l$  vale aqui. Relembrando, para acessar a distribuição estacionária fazemos uma sucessão de duas extrapolações, primeiro extrapolamos no tempo para obter o valor das razões  $R_\infty$ ,  $S_\infty$  e  $K_\infty$  no regime  $\xi \gg l$ , em seguida fazemos extrapolações em  $l$  para eliminar possíveis efeitos de tamanho finito. O resultado das extrapolações temporais estão mostrados nos gráficos da Fig. 6.8 como função da potência apropriada de  $1/l$  em cada caso. Nos gráficos da Figs. (a) e (b) temos a Skewness e a Kurtosis das LEHD em uma dimensão para os diferentes modelos, lembrando que nesse caso é desnecessário distinguir entre MAHD e MIHD. Novamente, notamos que após essa sucessão de extrapolações, os valores estimados de  $S$  e  $K$  dos diferentes modelos passam a concordar muito bem. Em duas dimensões, analisamos as razões  $S$  (símbolos vazados) e  $K$  (símbolos cheios) separadamente para MAHD e MIHD nas Figs. (c) e (d), respectivamente. Neste caso, notamos que os resultados da MIHD do modelo de Etching são não-monotônicos, impossibilitando a sua extrapolação, mas os demais resultados concordam entre si.



**Figura 6.8:** Resultado das extrapolações temporais de  $S$  (a) e  $K$  (b) das LEHD dos diferentes modelos em  $d = 1$ . Os valores extrapolados em  $d = 2$  são mostrados em (c) e (d) para a MAHD e MIHD, respectivamente, onde  $S$  (símbolos vazados) e  $K$  (símbolos cheios) são apresentados no mesmo painel.

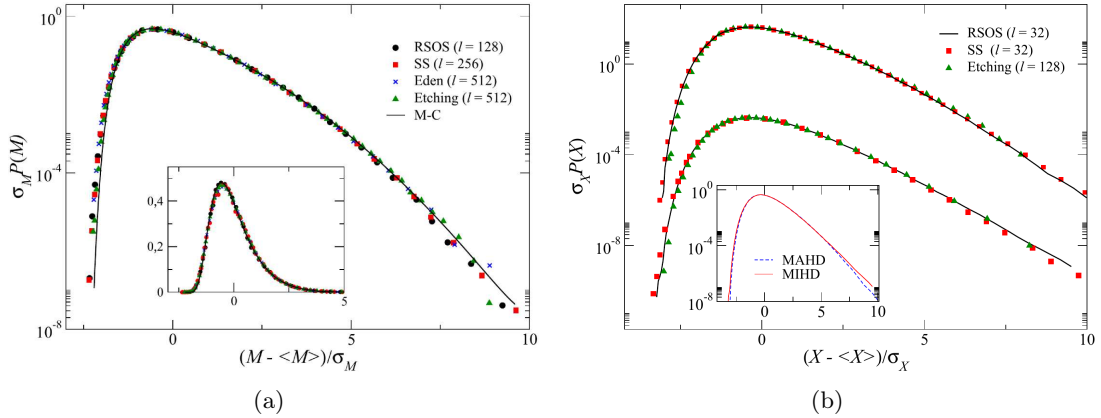
## 6.2 Distribuição de extremos locais



**Tabela 6.3:** Comparação das nossas estimativas de  $R$ ,  $S$  e  $K$  para as LEHD's com valores encontrados na literatura.

	R	S	K
$d = 1$ LEHD	3,00(5)	1,07(2)	1,60(3)
[91]	1,12	2,55	10,27
$d = 2$ MAHD	7,3(4)	0,84(2)	1,14(5)
[20] MAHD	–	0,884(?)	1,20(?)
$d = 2$ MIHD	7,3(4)	0,93(3)	1,35(10)
[20] MIHD	–	0,877(?)	1,17(?)

Na tabela 6.3 comparamos os nossos resultados com os reportados previamente na literatura. Em uma dimensão, comparamos com os resultados analíticos de Majumdar e Comtet [91]. Nesse caso notamos que nossa estimativa da razão  $R$  concorda com o resultado analítico, enquanto as estimativas de  $S$  e  $K$  são ligeiramente menores. Em duas dimensões, comparamos os nossos resultados com integrações numéricas obtidas em [20]. Apesar das barras de erro não englobarem nenhum desses resultados, os intervalos que obtivemos estão próximos dessas estimativas anteriores.



**Figura 6.9:** (a) LEHD's dos diferentes modelos em  $d = 1$  comparadas com a curva teórica obtida por Majumdar e Comtet [91]. O painel interno tem os mesmos dados em escala linear. (b) MAHD dos diferentes modelos em  $d = 2$  deslocadas duas décadas para cima e a MIHD. Os resultados para os modelos RSOS e Etching foram obtidos com CI plana e para o SS com CI curva. O painel interno compara a MAHD com a MIHD do modelo RSOS.

Para finalizar, comparamos a forma completa das LEHD, obtidas nos tempos finais de simulação sem nenhuma extrapolação. Em uma dimensão, as curvas dos diferentes modelos são mostradas junto com a distribuição analítica de Majumdar e Comtet [91] (ver Fig. 6.9(a)). O acordo é razoavelmente bom, com uma leve diferença na cauda à esquerda, que provavelmente é consequência de  $\xi \approx l$ . Em duas dimensões, mostramos as curvas da MAHD e MIHD na Fig. 6.9(b). No painel principal deslocamos as curvas dos máximos duas décadas para cima. Nessa figura podemos ver um bom acordo entre os diferentes modelos. No painel interno comparamos a MAHD com a MIHD para o modelo RSOS. Podemos notar que as distribuições são muito parecidas, com uma diferença mais evidente apenas na cauda

direita. Provavelmente, isso se deve ao valor da *skewness* da HD no estado estacionário em duas dimensões não ser grande o suficiente para produzir uma diferença mais acentuada. De fato,  $S = 0,27(1)$  de acordo com [137]. Finalmente, é interessante notar que novamente os resultados nos domínios crescentes (Eden em  $d = 1$  e SS em  $d = 2$ ) não diferem dos demais, o que significa que as LEHD também não dependem das CI's.

### 6.3 Conclusão

Motivados pelas diferentes propriedades estatísticas que superfícies da classe KPZ possuem de acordo com a CI, estudamos em detalhes a SLRD e as LEHD em busca de uma possível diferença causada por essa subdivisão. Notamos que essas diferenças se limitam a desvios nas relações de escala dos cumulantes da SLRD e LEHD em tempos curtos nos domínios crescentes, muito provavelmente causadas pelos tamanhos iniciais pequenos desses sistemas.

Sendo mais específico, para realizar esse estudo analisamos as distribuições SLRD e LEHD em diferentes regimes. Mostramos que as razões  $R$ ,  $S$  e  $K$  dessas distribuições no regime  $\xi \gg l$  podem ser obtidas com boa precisão mesmo em superfícies com  $\xi \sim l$ . Para tal, é necessário utilizar uma sucessão de extrapolações, primeiro se extrapola essas razões no tempo, para estimar o seu valor assintótico em função do tamanho de janela, em seguida se extrapola no tamanho de janela para remover efeitos de tamanho finito. Mostramos que esse método retorna valores próximos dos obtidos utilizando simulações para tempos dez vezes maiores. Além disso, mostramos que mesmo sem essas extrapolações, a forma completa das distribuições obtidas concorda bem com os resultados analíticos em  $d = 1$ , ou seja, as SLRD's para diferentes CI's em uma dimensão concordam com a curva teórica da Ref. [102], que obtém a rugosidade global em sistemas com condições de contorno abertas. Em duas dimensões as curvas com diferentes CI's concordam entre si. Para a LEHD a conclusão é análoga, em uma dimensão as diferentes CI's concordaram com a curva analítica da Ref. [91], obtida considerando o extremo global em sistemas com condições de contorno periódicas. Dessa concordância, concluímos que as condições de contorno não devem importar nesse caso, possivelmente porque a distribuição é dominada por uma única altura extrema na janela. Novamente, em duas dimensões, os resultados para diferentes CI's concordam entre si.

No regime  $\xi \lll l$ , verificamos que a SLRD de diversos modelos em diferentes dimensões tende para uma log-normal. Baseados nisso, argumentamos que o comprimento de correlação nesse caso deve ser irrelevante, e que todos os modelos em qualquer dimensão devem ter a mesma SLRD que a classe RD, que mostramos analiticamente ser uma log-normal.

No regime intermediário  $1 \ll \xi \ll l$ , obtivemos a relação de escala dos cumulantes da SLRD e das LEHD. Ressaltamos que a escala dos cumulantes da SLRD parece ser uma ferramenta muito útil na classificação de interfaces, visto que comparando a escala de dois dos cumulantes podemos obter todos os expoentes de escala mesmo em tempos curtos. Usando os resultados de [102], conseguimos obter essa escala analiticamente para a classe EW e verificamos que no limite inferior do regime ela está se relaciona à log-normal. Disso, e verificando que ela também funciona nos modelos LCM (MH) e CRSOS (VLDS), argumentamos que essa escala deve valer sempre. Por outro lado, a escala dos cumulantes das LEHD não se mostraram tão úteis, pois sofrem de fortes correções e apresentam *crossovers*, além de, na melhor das hipóteses, ser possível obter apenas o expoente  $\beta$  dessa escala.

Os resultados apresentados nesse capítulo foram publicados em [104].

## Capítulo 7

# Considerações finais

No decorrer desta tese nos concentramos na subdivisão geométrica de classes de universalidade, tentando entender melhor sua origem e seus efeitos. Para isso, utilizamos simulações de modelos discretos em substratos/domínios com tamanho lateral variável no tempo. No final do capítulo 2 e 3, explicamos em detalhes como são implementadas essas simulações e sua relação com a subdivisão da classe KPZ. No restante desses capítulos tentamos apresentar uma revisão didática abordando os principais conceitos e modelos envolvidos no crescimento e enrugamento cinético de interfaces. Esperamos que essa revisão seja útil para iniciantes no assunto.

O primeiro trabalho que apresentamos foi motivado por uma controvérsia entre importantes (e muito celebradas e citadas) realizações experimentais da classe KPZ em  $d = 1$ . Enquanto experimentos com deposição de partículas coloidais nas bordas de gotas em evaporação, aparentemente, obtiveram uma distribuição de alturas dada por GUE [17], em experimentos com cristal líquido em interfaces que também crescem “para dentro” no interior de um anel foi verificada a estatística GOE-Airy<sub>2</sub> [18]. Na primeira parte do capítulo 4 usamos simulações de domínios decrescentes para esclarecer essa discordância. Nessas simulações observamos que se  $L_0$  for grande, o sistema sempre apresenta um transiente na estatística GOE-Airy<sub>1</sub>- $C_t \sim t^{-1}$ , independentemente do substrato crescer ou decrescer. Assim, como domínios decrescentes necessitam de um tamanho inicial grande para que eles sejam estudados durante uma janela de tempo considerável, eles necessariamente apresentam esse transiente. Esses resultados concordam com os obtidos no cristal líquido, todavia, mostram que a explicação dada para a origem desse transiente em [18] está errada, visto que os autores dessa referência argumentam que esse transiente deve ser causado pelo sinal da curvatura da interface. Com relação à distribuição GUE obtida nos depósitos de partículas coloidais, argumentamos que a discordância acontece porque os resultados dessa referência envolveram sistemas com poucas monocamadas, onde a estatística da superfície é dominada por transientes sem universalidade alguma. Inclusive mostramos que é possível encontrar uma distribuição de altura em tempos curtos que concorde com GUE em sistemas que tem distribuição assintótica dada por GOE. Esses resultados e discussões foram recentemente submetidos ao periódico *Physical Review E* na seção *Rapid Communications*, ele já foi revisado algumas vezes e tudo indica que ele será aceito.

Pensando nessa discussão anterior, onde vimos que o decrescimento do tamanho do sistema, evoluindo em sentido contrário ao comprimento de correlação leva a uma transição abrupta quando eles se igualam, nos questionamos sobre qual seria o papel da competição entre a propagação das correlações e o crescimento do domínio na subdivisão da classe KPZ. Para explorar essa pergunta, estudamos sistemas que crescem com diferentes taxas. Muito pouco

precisa ser alterado para que o algoritmo descrito em [16] produza sistemas com tamanho  $L = L_0 + \omega t^\gamma$ , tanto crescentes ( $\omega > 0$ ) como decrescentes ( $\omega < 0$ ). Essa evolução do tamanho do sistema talvez pareça arbitrária demais, contudo, ela pode estar relacionada com a topologia do espaço onde ocorre o crescimento, como na Ref [135]. Mostramos que se  $\gamma < 1/z$  o sistema se torna correlacionado, produzindo uma rugosidade que escala com o tamanho do substrato  $W \sim L^\alpha \sim t^{\alpha\gamma}$  e uma distribuição de altura gaussiana. Verificamos que quando  $\gamma = 1/z$ , uma família de distribuições interpola a Gaussiana e a GUE a medida de  $\omega$  aumenta. Curiosamente, no meio dessa interpolação, quando  $\omega/(A|\lambda|)^{1/z} \approx 10$ , a HD parece ser dada pela GSE. Finalmente, se  $\gamma > 1/z$ , a HD é dada pela GUE, mas as covariâncias dependem de  $\gamma$ . A estatística completa da subclasse curva só é recuperada quando  $\gamma = 1$ . Claro que esse caso particular é muito mais importante que diversos outros por sua semelhança com agregados curvos reais, mesmo assim, podemos dizer que as formas das covariâncias obtida para sistemas curvos são um caso particular que resulta da competição entre o comprimento de correlação e o tamanho do sistema quando este último cresce linearmente no tempo. Esses resultados estão em fase final de preparação para a publicação. Pretendemos submetê-los para a seção *Rapid Communications* da *Physical Review E* ou na *Physical Review Letters*.

No capítulo 5, generalizamos os resultados da classe KPZ para outras classes. Nosso objetivo era verificar se a subdivisão “geométrica” era algo intrínseco à classe KPZ ou algo mais geral que abarca as demais classes de universalidade. Demos um enfoque maior à classe VLDS, tanto por sua importante ligação com crescimentos em MBE, que é uma das principais técnicas de crescimento de filmes finos, quanto por muito pouco ser conhecido sobre sua estatística no regime de crescimento, já que se trata também de uma classe não-linear. Assim, começamos esse capítulo estudando em detalhes esse regime em  $d = 1$  e  $2$ . Conseguimos obter a forma e verificar a universalidade da HD e das covariâncias espaciais e temporais. Comparando substratos de tamanho fixo com domínios crescentes verificamos uma dependência análoga à da classe KPZ com as CI’s, onde as HD’s e as covariâncias são universais e diferentes de uma subclasse para a outra. Curiosamente, as covariâncias espaciais apresentaram um mínimo local que desaparece em domínios crescentes, e as covariâncias temporais concordaram com as conjecturas propostas para interfaces planas (substrato fixo) [82] e curvas (substrato crescente) [83]. Esses resultados foram publicados como *Rapid Communication* no periódico *Physical Review E* [144].

Também procuramos por subdivisões nas classes EW e MH. Seguindo a mesma abordagem desenvolvida para a VLDS, verificamos uma dependência da HD e das covariâncias com a CI. Em ambas, a covariância temporal também concorda com as conjecturas recém comentadas. Na classe MH, a covariância espacial apresenta um mínimo local que também desaparece em substratos crescentes. Esse trabalho está praticamente concluído e deve ser submetidos em breve. De modo geral, esses resultados sugerem fortemente que a existência de subclasses é uma propriedade onipresente no crescimento de interfaces.

Ainda no capítulo 5, no final apresentamos alguns resultados preliminares sobre a forma da HD em modelos discretos com grandes comprimentos de difusão (LADP e CV). Esses modelos apresentaram transientes muito longos, tanto em  $d = 1$  quanto em  $d = 2$ , colocando em dúvida a universalidade das suas distribuições de altura. Porém, ficou evidente que quanto maior for a difusividade menor é esse transiente. Seria necessário confirmar a universalidade das distribuições de altura antes de tentar verificar uma possível diferença entre subclasses. Além disso, vale a pena ressaltar que o modelo CV é muito importante devido ao seu grau de realismo (superior aos demais modelos estudados nessa tese), por isso verificar se existe universalidade em sua distribuição de alturas assintótica seria muito interessante por si só. E, claro, se ela concorda com a distribuição de altura que atribuímos à classe VLDS. Em  $d = 2$ ,



de qualquer modo, esses resultados sugerem que deve ser muito difícil investigar distribuições de altura no crescimento epitaxial.

Também é natural se perguntar se outras grandezas universais variam devido à subdivisão das classes de universalidade. Duas importantes grandezas universais são a SLRD e a LEHD, ambas frequentemente usadas em experimentos e que foram importantes nas observações experimentais da classe KPZ em  $d = 2$  [8,20,21,23]. Além disso, uma diferença interessante é que essas distribuições estão associadas as flutuações estacionárias da superfície. No capítulo 6 estudamos elas nos regimes  $\xi \lll l$ ,  $1 \ll \xi \ll l$  e  $\xi \gg l$  separadamente. Nesse último, propusemos uma metodologia para se obter a forma das distribuições locais mesmo em comprimentos de correlação da ordem do tamanho da janela. Que consiste em uma sucessão de extrapolações, primeiro no tempo para acessar a forma assintótica, e depois no tamanho de janela para eliminar efeitos de tamanho finito. No regime  $\xi \lll l$  verificamos que a SLRD de diferentes classes e em  $d = 1$  e  $d = 2$  é dada por uma log-normal, que mostramos analiticamente ser a distribuição de rugosidades de crescimentos totalmente aleatórios, por isso o acordo entre as diferentes classes e dimensões. No regime intermediário obtivemos relações de escala para os cumulantes de ambas as distribuições locais. Ressaltamos que a escala dos cumulantes da SLRD são especialmente interessantes, uma vez que elas incluem dois dos expoentes de escala, além de envolver o  $\alpha$  global, contornando problemas produzidos pela rugosidade anômala. Finalmente, é interessante ressaltar que o algoritmo para crescimento lateral do substrato nos permitiu procurar por o efeitos da subdivisão de uma forma especialmente interessante, porque pudemos fixar o modelo e variar apenas a CI, efetivamente variando apenas a subclasse. Mesmo assim não encontramos nenhuma diferença entre a SLRD e a LEHD do caso plano e curvo. Esses resultados foram publicados na *Physical Review E* [104].

Por fim, esperamos que os resultados e discussões apresentados ao longo desta tese ajudem a entender a origem e os efeitos da subdivisão de classes de universalidade. Também esperamos impulsionar novos trabalhos em busca de evidências experimentais dessa subdivisão nas demais classes. Além dessa questão, acreditamos que as metodologias desenvolvidas no estudo da SLRD e da LEHD sejam úteis tanto em simulações quanto em experimentos.



## Apêndice A

# Cumulantes da SLRD da classe EW em $d = 1$ e da classe RD

Aqui, vamos primeiro repetir os cálculos feitos por Antal e Rácz em [102]. Em seguida, vamos usar os resultados para obter a relação de escala dos cumulantes da SLRD da classe EW. Depois disso, tomaremos o limite  $\nu \rightarrow 0$  para mostrar que a SLRD de interfaces aleatórias é uma log-normal e obter a escala dos cumulantes nesse caso.

Sendo  $w_2 = \bar{h}^2 - \bar{h}^2$ , como não é muito difícil se obter o  $h$  da classe EW, podemos obter a distribuição de rugosidades quadrática global fazendo

$$P_L(w_2, t) = \int \mathcal{D}[h] \delta[w_2 - (\bar{h}^2 - \bar{h}^2)] p(h, t) \quad (\text{A.1})$$

onde  $p(h, t)$  é a probabilidade da interface evoluir de um  $h(x, 0)$  para a configuração  $h(x, t)$ . A transformada de Laplace dessa última equação nos dá a função geratriz dos momentos

$$G_L(\zeta, t) = \int_0^\infty dw_2 P_L(w_2, t) e^{-w_2 \zeta} \quad (\text{A.2})$$

Como consequência da função  $\delta$  em A.1, obtemos

$$G_L(\zeta, t) = \int \mathcal{D}[h] p(h, t) e^{-\zeta(\bar{h}^2 - \bar{h}^2)} \quad (\text{A.3})$$

Essa integral de caminho vira um produto de infinitas integrais usuais se decomposmos  $h$  em seu espectro de Fourier

$$h(x, t) - \bar{h}(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m(t) e^{ik_m x} \quad (\text{A.4})$$

com  $k_m = 2\pi m/L$  e  $c_m = c_m^*$ , note também que a subtração da média faz  $c_0 = 0$ . Para uma interface da classe EW, a evolução dos coeficientes  $c_m$  é dada pela equação

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \sqrt{D} \eta(x, t) \Rightarrow \sum_{m=-\infty}^{\infty} \dot{c}_m(t) e^{ik_m x} = \nu \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m(t) (-k_m^2) e^{ik_m x} + \sqrt{D} \eta(x, t) \quad (\text{A.5})$$

Decompondo o ruído obtemos

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \dot{c}_m(t) e^{ik_m x} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left( -\nu k_m^2 c_m(t) e^{ik_m x} + \sqrt{D} \eta_m(t) e^{ik_m x} \right) . \quad (\text{A.6})$$

Essa equação nos diz que os coeficientes evoluem de forma desacoplada, cada um deles seguindo a equação de difusão de uma partícula sobre efeito de uma força elástica

$$\dot{c}_m(t) = -\nu k_m^2 c_m(t) + \eta_m(t) . \quad (\text{A.7})$$

Como consequência da evolução desacoplada dos modos vibracionais, a probabilidade de uma configuração inicial dada pelo conjunto  $\{c_m(0)\}$  evoluir para  $\{c_m(t)\}$  é o produto das probabilidades  $p_m[c_m(t)|c_m(0)]$  das evoluções individuais. O que significa que

$$\tilde{p}[c_m(t)|c_m(0)] = \prod_{m=-\infty}^{\infty} p_m[c_m(t)|c_m(0)] . \quad (\text{A.8})$$

Podemos obter essas probabilidades individuais resolvendo A.7. Utilizando a equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial}{\partial t} P(c_m, t) = \nu k_m^2 \frac{\partial}{\partial c_m} [c_m P] + \frac{D}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial c_m^2} . \quad (\text{A.9})$$

Podemos simplificar essa equação diferencial parcial aplicando a transformada de Laplace, que é o mesmo que tomar a função característica de  $P$ . Utilizando integrais por partes e considerando que, por questão de normalização,  $P$  e  $\partial P/\partial c_m$  tendem para zero quando  $c_m \rightarrow \infty$ , obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} G(q_m, t) = -\nu k_m^2 q_m \frac{\partial G}{\partial q_m} - \frac{D}{2} q_m^2 G . \quad (\text{A.10})$$

A solução dessa equação tem a forma

$$G(q_m, t) = \exp \left[ i \langle c_m(t) \rangle q_m - \langle c_m^2(t) \rangle_c q_m^2 / 2 \right] , \quad (\text{A.11})$$

que é a função característica de uma Gaussiana com

$$\frac{d}{dt} \langle c_m(t) \rangle = -\nu k_m^2 \langle c_m(t) \rangle \quad \text{e} \quad \frac{d}{dt} \langle c_m^2(t) \rangle_c = -2\nu k_m^2 \langle c_m^2(t) \rangle_c + D . \quad (\text{A.12})$$

Transformando de volta obtemos

$$p_m[c_m(t)|c_m(0)] = \frac{1}{2\pi \langle c_m^2(t) \rangle_c} \exp \left[ -\frac{|c_m(t) - \langle c_m(t) \rangle|^2}{2 \langle c_m^2(t) \rangle_c} \right] , \quad (\text{A.13})$$

com

$$\langle c_m(t) \rangle = c_m(0) e^{-\nu k_m^2 t} \quad \text{e} \quad \langle c_m^2(t) \rangle_c = \frac{D \left( 1 - e^{-2\nu k_m^2 t} \right)}{L\nu k_m^2} . \quad (\text{A.14})$$

Conhecendo  $p_m$  e usando a condição inicial plana ( $c_m(0) = 0$ ), podemos escrever A.2 como

$$G_L(\zeta, t) = \mathcal{N} \prod_{m=1}^{\infty} \int dc_m dc_m^* \frac{\exp \left\{ -2|c_m|^2 \left[ \zeta + 1/2 \langle c_m^2(t) \rangle_c \right] \right\}}{\langle c_m^2(t) \rangle_c^2} . \quad (\text{A.15})$$

Essa integral pode ser calculada escrevendo  $c_m = u + iv$  e  $c_m^* = u - iv$ , que resulta nas variáveis

## A SLRD da classe EW e da classe RD



$u = (c_m + c_m^*)/2$  e  $v = (c_m - c_m^*)/2i$ . Nessas novas variáveis é fácil mostrar que

$$G_L(\zeta, t) = \mathcal{N} \prod_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\langle c_m^2(t) \rangle_c (2\zeta \langle c_m^2(t) \rangle_c + 1)^2} , \quad (\text{A.16})$$

onde absorvemos as constantes que aparecem em  $\mathcal{N}$ . Aplicando a transformada inversa de Laplace obtemos

$$\langle w_2 \rangle_{\infty} P_L(w_2, t) = \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{dy}{2\pi i} e^{y \frac{w_2}{\langle w_2 \rangle}} \prod_{m=1}^{\infty} \frac{1}{1 + ya_m} , \quad (\text{A.17})$$

onde multiplicamos pela rugosidade no estado estacionário  $\langle w_2 \rangle_{\infty} = LD/12\nu$ , e definimos as variáveis  $a_m = 6(1 - e^{-\tau m^2})/(\pi m)^2$  e  $\tau = 8\pi\nu t/L^2 = 4\pi[\xi(t)/L]$ . O cálculo da integral anterior é feito coletando a contribuição dos polos simples em  $-1/a_m$  resultando em

$$\langle w_2 \rangle_{\infty} P_L(w_2, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{a_m} e^{a_m \frac{w_2}{\langle w_2 \rangle}} \prod_{m=1, m \neq n}^{\infty} \frac{a_m}{a_m - a_n} . \quad (\text{A.18})$$

Essa é a forma obtida por Antal e Rácz em [102]. Até aqui apenas repetimos os cálculos dessa referência, onde eles seguem adiante estudando o comportamento assintótico de tempos curtos e longos obtendo as curvas teóricas com as quais fizemos as comparações nas subseções 6.1.2 e 6.1.1. Para obter a escala dos cumulantes da distribuição de rugosidade, voltamos na função geratriz obtida em Eq. 6.1.2 e calculamos a função geratriz dos cumulantes, definida como  $\Psi_L = \ln G_L(\zeta, t)$ , com os cumulantes dados por

$$\langle w_2^n \rangle_c = (-1)^n \left. \frac{\partial^n \Psi_L}{\partial \zeta^n} \right|_{\zeta=0} = \frac{(n-1)! 6^n \langle w_2 \rangle_{\infty}^n}{\pi^{2n}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(1 - e^{-\tau m^2})^n}{m^{2n}} . \quad (\text{A.19})$$

Quando  $\tau \ll 1$ , ou seja,  $\xi(t) \ll L$  podemos aproximar a soma por uma integral fazendo  $\tau m^2 = s^2$  e  $\sqrt{\tau} = ds$ , que resulta em

$$\langle w_2^n \rangle_c = \frac{(n-1)! 6^n \langle w_2 \rangle_{\infty}^n}{\pi^{2n}} \tau^{n-1/2} \int_0^{\infty} \frac{(1 - e^{-s^2})^n}{s^{2n}} ds \sim \frac{D^n}{\sqrt{\nu}} L^{1-n} t^{n-1/2} , \quad (\text{A.20})$$

que concorda com a escala obtida nas nossas simulações para a classe EW como discutido na subseção 6.1.3.

Agora vamos mostrar que a SLRD de um crescimento totalmente aleatório em  $d$  dimensões é uma log-normal. Primeiramente notamos que nesse caso, como  $\nu = 0$ ,  $\langle c_m^2 \rangle_c = 2Dt/L^d$ . Isso faz com que as integrais em Eq. A.15 sejam independentes de  $m$ , o que levaria ao resultado dessa integral elevado a infinito. Para contornar esse problema nós discretizamos o espaço considerando que o crescimento ocorre em uma rede hipercúbica de espaçamento  $a$ . Isso introduz novos limites a expansão das alturas em série de Fourier na Eq. A.4, fazendo com que o maior valor de possível seja  $|k|_{\max} = \pi/a$ , que considerando  $a = 1$  resulta em

$$G_L(\zeta, t) = \mathcal{N} \langle c^2 \rangle_c (2\zeta \langle c^2 \rangle_c + 1)^{-L^d/2} , \quad (\text{A.21})$$

que leva aos cumulantes

$$\langle w_2^n \rangle_c = (n-1)! \frac{L^{(1-n)d}}{2} (4DT)^n . \quad (\text{A.22})$$

Para obter a distribuição completa novamente aplicando a transformada inversa de Laplace em  $G_L$ , levando a

$$P_L(w_2, t) = \mathcal{N} \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{d\zeta}{2\pi i} \frac{e^{\zeta w_2}}{\langle c^2 \rangle_c (2\zeta \langle c^2 \rangle_c + 1)^{L^d/2}} . \quad (\text{A.23})$$

Agora ao invés de termos uma coleção de polos simples, temos um único polo de ordem  $L^d/2$  em  $\zeta_0 = -1/2\langle c^2 \rangle_c$ , que resulta em

$$P(w_2, t) = \frac{1}{\langle w_2 \rangle} \Phi(x, t), \quad \text{com} \quad \Phi(x, t) = \frac{l^l}{(l-1)!} x^{l-1} e^{-lx} \quad (\text{A.24})$$

com  $l = L^d/2$ . Note que  $\Phi$  depende explicitamente apenas do tamanho do sistema, sendo independente do tempo. Da equação A.22 é evidente que os cumulantes dessa distribuição reescalada  $\Phi$  são  $\langle x^n \rangle_c = (n-1)!/l^{n-1}$ . Como já é esperado pelas discussões de Antal e Rácz, quando o tamanho do sistema diverge o único cumulante que não zera é  $\langle x \rangle = 1$ , o que significa que a distribuição tende para uma delta. Assim como os resultados para a classe EW, antes de tender para uma delta essa distribuição tende a uma log-normal. Para mostrar isso expandimos  $\Phi(x, t)$  em torno da sua média e escrevemos em função da diferença em relação a mesma usando  $\epsilon = x - 1$  e  $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle_c = 1/l$  obtemos

$$\Phi(\epsilon, t) = \frac{l^l e^{-l}}{(l-1)!} \frac{e^{-\frac{\epsilon - \ln(1+\epsilon)}{\sigma^2}}}{\epsilon + 1} . \quad (\text{A.25})$$

A primeira fração tende para  $1/(\sqrt{2\pi}\langle x \rangle_c)$  para  $l$  grande. Para valores próximos da média ( $\epsilon \ll 1$ ) podemos considerar  $[\epsilon - \ln(1 + \epsilon)] \approx \ln^2(1 + \epsilon)/2 + \epsilon^3/6$ , que separando em duas exponenciais e expandindo a segunda resulta em

$$\Phi(x, t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi x \sigma^2}} e^{-\ln^2(x)/2\sigma^2} \left( 1 - \frac{(x-1)^3}{6\sigma^2} \right) . \quad (\text{A.26})$$

Se redefinirmos a distância em relação a média  $\epsilon = x - 1$  em função da variância como  $\epsilon = b\sigma^2$ , notamos que a fração dentro do parêntese tende a  $b^3/(6\sqrt{l})$ , que tende a zero quando  $l$  é grande. E assim mostramos que a SLRD de um crescimento totalmente aleatório é uma log-normal. Para finalizar note que a escala dos cumulantes não muda após as aproximações que fizemos para chegar na forma log-normal. Para essa distribuição  $\langle x \rangle_c = e^{\sigma^2/2}$  e os demais cumulantes  $\langle x^n \rangle_c = \langle x \rangle_c^n (e^{\sigma^2} - 1)^{n-1} g_n$  com  $g_n = \text{const} + O(e^{\sigma^2})$ . Assim, como  $\sigma \sim 1/L^d$  obtemos  $\langle x \rangle_c = 1$  e  $\langle x^n \rangle_c \sim L^{(n-1)d}$ .

# Referências Bibliográficas

- [1] J. Zhang, Y. C. Zhang, P. Alstrom, M. T. Levinsen; “*Modeling forest fire by a paper-burning experiment, a realization of the interface growth mechanism*”; *Physica A* **189**, 383–389 (1992).
- [2] A. M. Miranda, I. L. Menezes-Sobrinho, M. S. Couto; “*Spontaneous Imbibition Experiment in Newspaper Sheets*”; *Physical Review Letters* **104**, 086101 (2010).
- [3] H. Löwe, L. Egli, S. Bartlett, M. Guala, C. Manes; “*On the evolution of the snow surface during snowfall*”; *Geophysical Research Letters* **34**, L21507 (2007).
- [4] K. J. Måløy, J. Schmittbuhl; “*Dynamical Event during Slow Crack Propagation*”; *Physical Review Letters* **87**, 105502 (2001).
- [5] M. A. C. Huergo, M. A. Pasquale, A. E. Bolzán, and A. J. Arvia; “*Morphology and dynamic scaling analysis of cell colonies with linear growth fronts*”; *Physical Review E* **82**, 031903 (2010)
- [6] S. Kimiagar; “*Fractal Shape of Cancer Tumor Growth*”; *Biochemistry and Biophysics* **1**, 7–12 (2013).
- [7] M. A. C. Huergo, M. A. Pasquale, P. H. González, A. E. Bolzán, A. J. Arvia; “*Dynamics and morphology characteristics of cell colonies with radially spreading growth fronts*”; *Physical Review E* *84*, 021917 (2011).
- [8] R. A. L. Almeida, S. O. Ferreira, T. J. Oliveira, F. D. A. Araao Reis; “*Universal fluctuations in the growth of semiconductor thin films*”; *Physical Review B* **89**, 045309 (2014).
- [9] M. Prähofer, H. Spohn; “*Universal Distributions for Growth Processes in 1+1 Dimensions and Random Matrices*”; *Physical Review Letters* **84**, 4882 (2000).
- [10] K. A. Takeuchi, M. Sano; “*Universal Fluctuations of Growing Interfaces: Evidence in Turbulent Liquid Crystals*”; *Physical Review Letters* **104**, 230601 (2010).
- [11] K. A. Takeuchi, M. Sano, T. Sasamoto, H. Spohn; “*Growing interfaces uncover universal fluctuations behind scale invariance*”; *Scientific Reports* **1**, 34 (2011).
- [12] K. A. Takeuchi, M. Sano; “*Evidence for Geometry-Dependent Universal Fluctuations of the Kardar–Parisi–Zhang Interfaces in Liquid–Crystal Turbulence*”; *Journal of Statistical Physics* **147**, 853–90 (2012).
- [13] S. G. Alves , T. J. Oliveira, S. C. Ferreira; “*Universal fluctuations in radial growth models belonging to the KPZ universality class*”; *Europhysics Letters* **96**, 48003 (2011).

## Referências



- [14] T. J. Oliveira, S. C. Ferreira, S. G. Alves; “*Universal fluctuations in Kardar–Parisi–Zhang growth on one–dimensional flat substrates*”; *Physical Review E* **85**, 010601 (2012).
- [15] S. G. Alves, T. J. Oliveira, S. C. Ferreira; “*Non–universal parameters, corrections and universality in Kardar–Parisi–Zhang growth*”; *Journal of Statistical Mechanics* P05007 (2013).
- [16] I. S. S. Carrasco, K. A. Takeuchi, S. C. Ferreira, T. J. Oliveira; “*Interface fluctuations for deposition on enlarging flat substrates*”; *New Journal of Physics* **16**, 123057 (2014)
- [17] P. J. Yunker, M. A. Lohr, T. Still, A. Borodin, D. J. Durian, A. G. Yodh; “*Effects of Particle Shape on Growth Dynamics at Edges of Evaporating Drops of Colloidal Suspensions*”; *Physical Review Letters* **110**, 035501 (2013).
- [18] Y. T. Fukai, K. A. Takeuchi; “
- [19] ”; *Physical Review Letters* **119**, 030602 (2017).
- [20] T. Halpin-Healy, G. Palasantzas; “*Universal correlators & distributions as experimental signatures of (2 + 1)-dimensional Kardar-Parisi-Zhang growth*”; *Europhysics Letters* **105**, 50001 (2014).
- [21] R. A. L. Almeida, S. O. Ferreira, I. R. B. Ribeiro, T. J. Oliveira; “*Temperature effect on (2 + 1) experimental Kardar-Parisi-Zhang growth*”; *Europhysics Letters* **109**, 46003 (2015).
- [22] T. Halpin-Healy, K. A. Takeuchi; “*A KPZ Cocktail- Shaken, not stirred... Toasting 30 years of kinetically roughened surfaces*”; *Journal of Statistical Physics* **160**, 794–814 (2015).
- [23] R. A. L. Almeida, S. O. Ferreira, I. Ferraz, T. J. Oliveir; “*Initial pseudo-steady state & asymptotic KPZ universality in semiconductor on polymer deposition*”; *Scientific Reports* **7**, 3773 (2017).
- [24] T. Tomé, M. J. Oliveira; “*Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*”; Editora da Universidade de São Paulo.
- [25] T. Tomé, M. J. de Oliveira; “*Entropy Production in Nonequilibrium Systems at Stationary State*”; *Physical Review Letters* **108**, 020601 (2012).
- [26] A. Pimpinelli, J. Villain; “*Physics of Crystal Growth*”; Cambridge University Press.
- [27] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin; “*Física do Estado Sólido*”; Cengage Learning, São Paulo, (2011).
- [28] R. L. Schwoebel, E. J. Shipsey; “*Step Motion on Crystal Surfaces*”; *Journal of Applied Physics* **37**, 3682 (1966).
- [29] J. Krug; “*Origins of scale invariance in growth processes*”; *Advances in Physics*, **46**, 139–282 (1997).
- [30] M. Kardar; “*Statistical Physics of Fields*”; Cambridge University Press.
- [31] S. das Sarma; “*Kinetic Surface Roughening and Molecular Beam Epitaxy*”; *Fractals* **1**, 784–794 (1993).

## Referências



- [32] F. F. Leal, S. C. Ferreira, S. O. Ferreira; “*Modelling of epitaxial film growth with an Ehrlich–Schwoebel barrier dependent on the step height*”; *Journal of Physics: Condensed Matter* **23**, 292201 (2011).
- [33] A.-L. Barabási, H. E. Stanley; “*Fractal Concepts in Surface Growth*”; Cambridge University Press.
- [34] B. B. Mandelbrot; “*Fractal geometry: what is it, and what does it do?*”; *Proceedings of the Royal Society A* **423**, 3–16 (1989).
- [35] F. Family, T. Vicsek; “*Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model*”; *J. Phys. A* **18**, L75 (1985).
- [36] J. Maunukela, M. Myllys, J. Timonen, M. J. Alava, T. Ala-Nissila; “*Kardar–Parisi–Zhang scaling in kinetic roughening of fire fronts*”; *Physica A* **266**, 372–376 (1999).
- [37] H. Löwe, L. Egli, S. Bartlett, M. Guala, C. Manes; “*On the evolution of the snow surface during snowfall*”; *Geophysical Research Letters*, **34**, L21507 (2007).
- [38] P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld; “*Self-organized criticality: An explanation of the 1/f noise*”; *Physical Review Letters* **59**, 381 (1987).
- [39] G. Grinstein, D.-H. Lee; “*Conservation Laws, Anisotropy, and "Self-Organized Criticality" in Noisy Nonequilibrium Systems*”; *Physical Review Letters* **64**, 1927 (1990)
- [40] R. Dickman, M. A. Muñoz, A. Vespignani, S. Zapperi; “*Paths to self-organized criticality*”; *Brazilian Journal of Physics* **30**, 27–41 (2000)
- [41] N. W. Watkins, G. Pruessner, S. C. Chapman, N. B. Crosby, H. J. Jensen; “*25 Years of Self-organized Criticality: Concepts and Controversies*”; *Space Science Reviews* **198**, 3–44 (2016).
- [42] José J. Ramasco, J. M. López, M. A. Rodríguez; “*Generic Dynamic Scaling in Kinetic Roughening*”; *Physical Review Letters* **84**, 2199 (2000).
- [43] R. Chiarello, V. Panella, J. Krim, C. Thompson; “*X-Ray Reflectivity and Adsorption Isotherm Study of Fractal Scaling in Vapor-Deposited Films*”; *Physical Review Letters* **67**, 3408 (1991).
- [44] J. Krim, J. O. Indekeu; “*Roughness exponents: A paradox resolved*”; *Physical Review E* **48**, 1576 (1993)
- [45] T. Dieker, M. Mandjes; “*Simulation of fractional Brownian motion*”; *Dissertação de mestrado defendida na University of Twente Department of Mathematical Sciences, The Netherlands* (2004).
- [46] B. B. Mandelbrot, J. W. van Ness; “*Fractional Brownian motions, fractional noises and applications*”; *SIAM Review* **10**, 422–437 (1968).
- [47] M. Kardar, G. Parisi, Y.-C. Zhang; “*Dynamic Scaling of Growing Interfaces*”; *Physical Review Letters* **56**, 889–892 (1986).



- [48] M. Kardar; “*Replica Bethe Ansatz Studies of Two-dimensional Interfaces With Quenched Random Impurities*”; Nuclear Physics B **290**, 582-602 (1987).
- [49] J. M. Burgers; “*The Nonlinear Diffusion Equation*”; Riedel, Boston, (1974).
- [50] J. Kelling, G. Ódor; “*Extremely large-scale simulation of a Kardar-Parisi-Zhang model using graphics cards*”; Physical Review E **84**, 061150 (2011).
- [51] A. Pagnani, G. Parisi; “*Numerical estimate of the Kardar-Parisi-Zhang universality class in  $(2+1)$  dimensions*”; Physical Review E **92**, 010101(R) (2015).
- [52] S. F. Edwards, D. R. Wilkinson; “*The surface statistics of a granular aggregate*”; Proceedings of the Royal Society A **381**, 17–31 (1982).
- [53] J. Villain; “*Continuum models of crystal growth from atomic beams with and without desorption*”; J. Phys. I **1**, 19 (1991).
- [54] Z.-W. Lai, S. Das Sarma; “*Kinetic Growth with Surface Relaxation: Continuum versus Atomistic Models*”; Physical Review Letter **66**, 2348 (1991).
- [55] H. K. Janssen; “*On Critical Exponents and the Renormalization of the Coupling Constant in Growth Models with Surface Diffusion*”; Physical Review Letters **78**, 1082 (1997).
- [56] F. D. A. Aarão Reis; “*Numerical study of discrete models in the class of the nonlinear molecular beam epitaxy equation*”; Physical Review E **70**, 031607 (2004).
- [57] T. J. Oliveira and F. D. A. Aarão Reis; “*Finite-size effects in roughness distribution scaling*”; Physical Review E **76**, 061601 (2007)
- [58] T. Singha, M. K Nandy; “*A renormalization scheme and skewness of height fluctuations in  $(1 + 1)$ -dimensional VLDS dynamics*”; Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment (2016), 023205.
- [59] W. W. Mullins; “*Theory of Thermal Grooving*”; Journal of Applied Physics **28**, 333 (1957).
- [60] C. Herring; “*Effect of Change of Scale on Sintering Phenomena*”; Journal of Applied Physics **21**, 301 (1950).
- [61] C. Tracy, H. Widom; “*Level-spacing distributions and the Airy kernel*”; Communications in Mathematical Physics **159**, 151 (1994). Uma revisão muito didática sobre matrizes aleatórias pode ser encontrada em: A.C. Bertuola, M.S. Hussein, M.P. Pato; “*Técnicas de construções de ensembles de matrizes aleatórias e estatísticas correlates*”; Revista Brasileira de Ensino de Física, **28**, 333–340 (2006).
- [62] J. Baik, P. Deift, K. Johansson; “*On the distribution of the length of the longest increasing subsequence of random permutations*”; Journal of the American Mathematical Society **12**, 1119–1178 (1999).
- [63] F. C. Frank; “*Nucleation-Controlled Growth on a One-Dimensional Growth of Finite Length*”; Journal of Crystal Growth **22**, 233 (1974)
- [64] G. H. Gilmer; “*Transients in the Rate of Crystal Growth*”; Journal of Crystal Growth **49**, 465 (1980).





- [65] K. Johansson; “*Shape Fluctuations and Random Matrices*”; Communications in Mathematical Physics **209**, 437–476 (2000).
- [66] T. Halpin–Healy; “*(2+1)–Dimensional Directed Polymer in a Random Medium: Scaling Phenomena and Universal Distributions*”; Physical Review Letters **109**, 170602 (2012).
- [67] T. J. Oliveira, S. G. Alves, S. C. Ferreira; “*Kardar–Parisi–Zhang universality class in (2+1) dimensions: Universal geometry–dependent distributions and finite–time corrections*”; Physical Review E **87**, 040102 (2013).
- [68] T. Halpin–Healy; “*Extremal paths, the stochastic heat equation, and the three–dimensional Kardar–Parisi–Zhang universality class*”; Physical Review E **88**, 042118 (2013).
- [69] S. T. Bramwell, K. Christensen, J.-Y. Fortin, P. C. W. Holdsworth, H. J. Jensen, S. Lise, J. M. López, M. Nicodemi, J.-F. Pinton, and M. Sellitto; “*Universal Fluctuations in Correlated Systems*”; Physical Review Letters **84**, 3744 (2000).
- [70] T. Sasamoto, H. Spohn; “*One-Dimensional Kardar–Parisi–Zhang Equation: An Exact Solution and its Universality*”; Physical Review Letters **104**, 230602 (2010).
- [71] P. Calabrese, P. Le Doussal ; “*Exact Solution for the Kardar–Parisi–Zhang Equation with Flat Initial Conditions*”; Physical Review Letters **106**, 250603 (2011).
- [72] F. J. Dyson; “*A Brownian-Motion Model for the Eigenvalues of a Random Matrix*”; Journal of Mathematical Physics **3**, 1191 (1962).
- [73] C. A. Tracy, H. Widom; “*Matrix Kernels for the Gaussian Orthogonal and Symplectic Ensembles*”; Ann. Inst. Fourier, Grenoble **55**, 2197–2207 (2005); arXiv:math-ph/0405035.
- [74] M. L. Mehta; “*Random matrices*”; Elsevier/Academic Press, Amsterdam. (2004)
- [75] F. Bornemann; “*On the Numerical Evaluation of Fredholm Determinants*”; Mathematics of Computation **79**, 871–915 (2010).
- [76] T. Sasamoto; “*Spatial correlations of the 1D KPZ surface on a flat substrate*”; Journal Physics A **38**, L549–L556 (2005).
- [77] A. Borodin, P. L. Ferrari, M. Prähofer, T. Sasamoto; “*Fluctuation properties of the TASEP with periodic initial configuration*”; Journal Statistical Physics **129**, 1055–1080 (2007).
- [78] A. Borodin, P.L. Ferrari, T. Sasamoto; “*Large time asymptotics of growth models on space-like paths II: PNG and parallel TASEP*”; Communications in Mathematical Physics **283**, 417–449 (2008).
- [79] M. Prähofer, H. Spohn; “*Scale invariance of the PNG droplet and the Airy process*”; Journal Statistical Physics **108**, 1071–1106 (2002).
- [80] K. Johansson; “*Discrete polynuclear growth and determinantal processes*”, Communications Mathematical Physics **242**, 277–329 (2003).



- [81] F. Bornemann, P. L. Ferrari, M. Prähofer; “*The Airy<sub>1</sub> Process is not the Limit of the Largest Eigenvalue in GOE Matrix Diffusion*”; Journal Statistical Physics **133**, 405–415 (2008).
- [82] H. Kallabis, J. Krug; “*Persistence of Kardar-Parisi-Zhang interfaces*”; Europhysics Letters **45**, 20 (1999).
- [83] S. B. Singha; “*Persistence of surface fluctuations in radially growing surfaces*”; Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment (2005) P08006.
- [84] M. Eden; “*Poc. 4th Berkeley Symposium on Mathematical Stationary and Probability*”; ed F Neyman (Berkeley, CA: University of California Press) **4**, 233 (1961).
- [85] M. Henkel, M. Pleimling; “*Non-Equilibrium Phase Transitions. Volume 2: Ageing and Dynamical Scaling Far from Equilibrium*”; Springer.
- [86] T. Paiva, F.D.A.Aarão Reis; “*Height and roughness distributions in thin films with Kardar–Parisi–Zhang scaling*”; Surface Science **601**, 419–424 (2007).
- [87] I. S. Brandt, V. C. Zoldan, V. Stenger, C. C. Plá Cid, A. A. Pasa, T. J. Oliveira, F. D. A. Aarão Reis; “*Substrate effects and diffusion dominated roughening in Cu<sub>2</sub>O electrodeposition*”; Journal of Applied Physics **118**, 145303 (2015).
- [88] S. Kotz, S. Nadarajah; “*Extreme Value Distributions*”; Imperial College Press (2000).
- [89] S. Raychaudhuri, M. Cranston, C. Przybyla, Y. Shapir; “*Maximal Height Scaling of Kinetically Growing Surfaces*”; Physical Review Letters **87**, 136101 (2001).
- [90] G. Györgyi, N. R. Moloney, K. Ozogány, Z. Rácz; “*Maximal height statistics for  $1/f^\alpha$  signals*”; Physical Review E **75**, 021123 (2007).
- [91] S. N. Majumdar, A. Comtet; “*Exact Maximal Height Distribution of Fluctuating Interfaces*”; Physical Review Letters **92**, 225501 (2004).
- [92] G. Schehr, S.N.Majumdar; “*Universal asymptotic statistics of maximal relative height in one-dimensional solid-on-solid models*”; Physical Review E **73**, 056103 (2006).
- [93] D.-S. Lee; “*Distribution of Extremes in the Fluctuations of Two-Dimensional Equilibrium Interfaces*”; Physical Review Letters **95**, 150601 (2005).
- [94] T. J. Oliveira, F. D. A. Aarão Reis; “*Maximal- and minimal-height distributions of fluctuating interfaces*”; Physical Review E **77**, 041605 (2008).
- [95] J. Rambeau and G. Schehr; “*Extremal statistics of curved growing interfaces in 1+1 dimensions*”; Europhysics Letters **91**, 60006 (2010).
- [96] G. Foltin, K. Oerding, Z. Rácz, R. L. Workman, R. K. P. Zia; “*Width distribution for random-walk interfaces*”; Physical Review E **50**, R639 (1994).
- [97] M. Plischke, Z. Rácz, R. K. P. Zia; “*Width distribution of curvature-driven interfaces: A study of universality*”; Physical Review E **50**, 3589 (1994).
- [98] Z. Rácz, M. Plischke; “*Width distribution for (2+1)-dimensional growth and deposition processes*”; Physical Review E **50**, 3530 (1994).

## Referências



- [99] F. D. A. Aarão Reis; “*Numerical study of roughness distributions in nonlinear models of interface growth*”; Physical Review E **72**, 032601 (2005).
- [100] V. G. Miranda, F. D. A. Aarão Reis; “*Numerical study of the Kardar-Parisi-Zhang equation*”; Physical Review E **77**, 031134 (2008).
- [101] J. Kelling, G. Ódor; “*Extremely large-scale simulation of a Kardar-Parisi-Zhang model using graphics cards*”; Physical Review E **84**, 061150 (2011).
- [102] T. Antal and Z. Ráacz; “*Dynamic scaling of the width distribution in Edwards-Wilkinson type models of interface dynamics*”; Physical Review E **54**, 2256 (1996).
- [103] T. Antal, M. Droz, G. Györgyi, Z. Ráacz; “*Roughness distributions for  $1/f^\alpha$  signals*”; Physical Review E **65**, 046140 (2002).
- [104] I. S. S. Carrasco, T. J. Oliveira; “*Width and extremal height distributions of fluctuating interfaces with window boundary conditions*”; Physical Review E **93**, 012801 (2016).
- [105] R. Jullien, R. Botet; “*Scaling properties of surface of the Eden model in  $d = 2,3,4$* ”; Journal of Physics A: Mathematical and General **18**, 2279–2287 (1985).
- [106] P. L. Ferrari, M. Prähofer; “*One-dimensional stochastic growth and gaussian ensembles of random matrices*”; Proceedings of Inhomogeneous Random Systems 2005, Markov Processes Related Fields **12**, 203–234 (2006).
- [107] P. Meakin, P. Ramanlal, L. M. Sander, R. C. Ball; “*Ballistic deposition on surfaces*”; Physical Review A **34**, 5091 (1986).
- [108] L. Santen, C. Appert; “*The Asymmetric Exclusion Process Revisited: Fluctuations and Dynamics in the Domain Wall Picture*”; Journal of Statistical Physics **106**, 187–199 (2002).
- [109] J. M. Kim, J. M. Kosterlitz; “*Growth in a restricted solid-on-solid model*”; Physical Review Letters **62**, 2289 (1989).
- [110] B. A. Mello, A. S. Chaves, F. A. Oliveira; “*Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid*”; Physical Review E **63**, 041113 (2001).
- [111] L. R. Paiva, S. C. Ferreira; “*Universality class of isotropic on-lattice Eden clusters*”; Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **40**, F43 (2007).
- [112] F. Family; “*Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion*”; Journal of Physics A: Mathematical and General **19**, L441 (1986).
- [113] Y. Kim, D. K. Park, J. M. Kim; “*Conserved growth in a restricted solid-on-solid model*”; Journal of Physics A: Mathematical and General **27**, L533 (1994).
- [114] P. Punyindu, S. Das Sarma; “*Noise reduction and universality in limited-mobility models of nonequilibrium growth*”; Physical Review E **57**, R4863(R) (1998).
- [115] Z.-p. Xun, Z. Zhang, L. Wu, H. Xia, D.-p. Hao, Y. Yang, Y.-L. Chen, G. Tang; “*Large-scale numerical study on the dynamic scaling behavior of Das Sarma-Tamborenea model by employing noise reduction technique*”; Europhysics Letters **111**, 60012 (2015).

## Referências



- [116] S. Das Sarma and P. Tamborenea; “*A new universality class for kinetic growth: One-dimensional molecular-beam epitaxy*”; *Physical Review Letters* **66**, 325 (1991).
- [117] F. D. A. Aarão Reis; “*Dynamic scaling in thin-film growth with irreversible step-edge attachment*”; *Physical Review E* **81**, 041605 (2010).
- [118] S. Clarke, D. D. Vvedensky; “*Growth kinetics and step density in reflection high-energy electron diffraction during molecular-beam epitaxy*”; *Journal of Applied Physics* **63**, 2272 (1988).
- [119] C. C. Battaile; “*The Kinetic Monte Carlo method: Foundation, implementation, and application*”; *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **197**, 3386–3398 (2008).
- [120] Z. Xun, G. Tang, K. Han, H. Xia, D. Hao, Y. Li; “*Asymptotic dynamic scaling behavior of the (1+1)-dimensional Wolf-Villain model*”; *Physical Review E* **85**, 041126 (2012).
- [121] S. Das Sarma, P. P. Chatrathorn, Z. Toroczkai; “*Universality class of discrete solid-on-solid limited mobility nonequilibrium growth models for kinetic surface roughening*”; *Physical Review E* **65**, 036144 (2002).
- [122] A. Chame, F. D. A. Aarão Reis; “*Scaling of local interface width of statistical growth models*”; *Surface Science* **553**, 145–154 (2004).
- [123] C.-H. Lam, F. G. Shin; “*Improved discretization of the Kardar-Parisi-Zhang equation*”; *Physical Review E* **58**, 5592-5595 (1998).
- [124] C. Dasgupta, S. Das Sarma, J. M. Kim; “*Controlled instability and multiscaling in models of epitaxial growth C.*”; *Physical Review E* **54**, R4552–R4555 (1996).
- [125] C. Dasgupta, J. M. Kim, M. Dutta, S. Das Sarma ; “*Instability, intermittency, and multiscaling in discrete growth models of kinetic roughening*”; *Physical Review E* **55**, 2235–2254 (1997).
- [126] C.-H. Lam, F. G. Shin ; “*Anomaly in numerical integrations of the Kardar-Parisi-Zhang equation*”; *Physical Review E* **57**, 6506–6511 (1998).
- [127] J. M. Pastor, J. Galeano; “*New dynamic scaling in increasing systems*”; *Central European Journal of Physics* **5**, 539–548 (2007).
- [128] C. Escudero; “*Stochastic growth equations on growing domains*”; *Journal of Statistical Mechanics* (2009), P07020.
- [129] A. A. Masoudi, S. Hosseinabadi, J. Davoudi, M. Khorrami, M. Kohandel; “*Statistical analysis of radial interface growth*”; *Journal of Statistical Mechanics* (2012), L02001.
- [130] I. S. S. Carrasco, T. J. Oliveira, S. C. Ferreira; “*Estudo de modelos de crescimento em substratos que crescem lateralmente*”; *Dissertação de mestrado defendida no Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa, Brasil* (2014).
- [131] C. Escudero; “*Dynamic Scaling of Non-Euclidean Interfaces*”; *Physical Review Letters* **100**, 116101 (2008).  
J. Krug; “*Comment on Dynamic Scaling of Non-Euclidean Interfaces*” *ibid* **102**, 139601 (2009)  
C. Escudero; “*Escudero Replies*”; *ibid* **102**, 139602 (2009).



- [132] M. Nicoli, R. Cuerno, M. Castro; “*Comment on “Effects of Particle Shape on Growth Dynamics at Edges of Evaporating Drops of Colloidal Suspensions”*”; *Physical Review Letters* **111**, 209601 (2013).
- [133] T. J. Oliveira, F. D. A. Aarão Reis; “*Simulating the initial growth of a deposit from colloidal suspensions*”; *Journal of Statistical Mechanics*, P09006 (2014).
- [134] S. N. Santalla, J. R.-Laguna, T. LaGatta, R. Cuerno; “*Random geometry and the Kardar–Parisi–Zhang universality class*”; *New Journal of Physics* **17**, 033018 (2015).
- [135] S. N. Santalla, J. R.-Laguna, A. Celi, R. Cuerno; “*Topology and the Kardar–Parisi–Zhang universality class*”; *Journal of Statistical Mechanics*, 023201 (2017).
- [136] S. Chhita, P.L. Ferrari, H. Spohn; “*Limit distributions for KPZ growth models with spatially homogeneous random initial conditions*”; arXiv:1611.06690, (2017).
- [137] E. Marinari, A. Pagnani, G. Parisi; “*Critical exponents of the KPZ equation via multi-surface coding numerical simulations*”; *Journal of Physics A: Mathematical and General* **33**, 8181–8192 (2000).
- [138] J. G. Amar, F. Family; “*Universal scaling function and amplitude ratios in surface growth*”; *Physical Review A* **45**, R3373(R) (1992).
- [139] J. G. Amar, F. Family; “*Universality in surface growth: Scaling functions and amplitude ratios*”; *Physical Review A* **45**, 5378 (1992).
- [140] S.-C. Park, D. Kim, J.-M. Park; “*Derivation of continuum stochastic equations for discrete growth models*”; *Physical Review E* **65**, 015102(R) (2001).
- [141] S.-C. Park, J.-M. Park, D. Kim; “*Universality class of the restricted solid-on-solid model with hopping*”; *Physical Review E* **65**, 036108 (2002).
- [142] T. J. Oliveira, S. G. Alves, S. C. Ferreira; “*Kardar-Parisi-Zhang universality class in (2+1) dimensions: Universal geometry-dependent distributions and finite-time corrections*”; *Physical Review E* **87**, 040102(R)(2013).
- [143] J. Krug, P. Meakin, T. Halpin-Healy; “*Amplitude universality for driven interfaces and directed polymers in random media*”; *Physical Review A* **45**, 638 (1992).
- [144] I. S. S. Carrasco, T. J. Oliveira; “*Universality and dependence on initial conditions in the class of the nonlinear molecular beam epitaxy equation*”; *Physical Review E* **94**, 050801(R) (2016).
- [145] F. D. A. Aarão Reis; “*Scaling of local roughness distributions*”; *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* (2015), P11020.
- [146] S. G. Alves, T. J. Oliveira, S. C. Ferreira; “*Origins of scaling corrections in ballistic growth models*”; *Physical Review E* **90**, 052405 (2014).