

ANDERSON DE JESUS PEREIRA

**EFEITO DE UMA BARREIRA CINÉTICA EM MODELOS
DE CRESCIMENTO DE INTERFACES COM
MOBILIDADE LIMITADA**

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

**VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2012**

**Ficha catalográfica preparada pela Seção de Catalogação e
Classificação da Biblioteca Central da UFV**

T

P436e
2012

Pereira, Anderson de Jesus, 1979-

Efeito de uma barreira cinética em modelos de crescimento de interfaces com mobilidade limitada / Anderson de Jesus Pereira. – Viçosa, MG, 2012.

xii, 59f. : il. ; (algumas col.) ; 29cm.

Inclui apêndices.

Orientador: Sidiney Geraldo Alves.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 55-59.

1. Física estatística. 2. Monte Carlo, Método de. 3. Filmes finos. 4. Superfície (Física). 5. Aspereza de superfície.

I. Universidade Federal de Viçosa. II. Título.

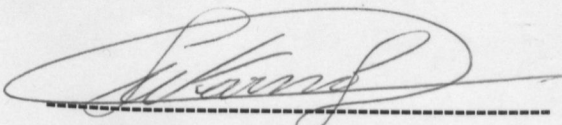
CDD 22. ed. 530

ANDERSON DE JESUS PEREIRA

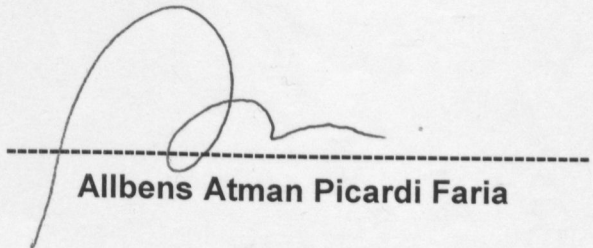
EFEITO DE UMA BARREIRA CINÉTICA EM MODELOS DE CRESCIMENTO DE
INTERFACES COM MOBILIDADE LIMITADA

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

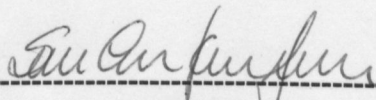
APROVADA: 19 de julho de 2012.



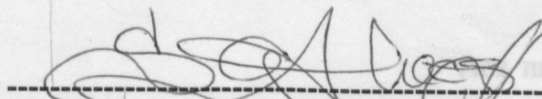
Sukarno Olavo Ferreira



Allbens Atman Picardi Faria



Silvio da Costa Ferreira Junior
(Coorientador)



Sidiney Geraldo Alves
(Orientador)

meus pais, João e Madalena,
meus irmãos, Jan, Ronivon, Alex-
sandro e Lilian. À minha amada es-
posa, Edilaine.

Aos meus pais, João e Madalena,
meus irmãos, Jan, Ronivon, Alex-
sandro e Lilian. À minha amada es-
posa, Edilaine.

“Só há duas maneiras de viver a vida: a primeira é vivê-la como se os milagres não existissem. A segunda é vivê-la como se tudo fosse milagre. ”

Albert Einstein

Agradecimentos

Aos meus pais João e Madalena, meus irmãos, Jan, Ronivon, Alexsandro e Lilian que sempre me apoiaram.

Aos professores e funcionários do Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa.

A todos os estudantes da pós-graduação, em especial à turma da sala 213, com os quais dei boas gargalhadas e passei bons momentos.

Ao meu orientador Prof. Sidiney Geraldo Alves, pelos preciosos ensinamentos e discussões realizadas ao longo desses dois anos de mestrado. Pelos valorosos ensinamentos em FORTRAN, XMGRACE, GNUPLOT, LATEX, E OUTROS; softwares com os quais os trabalhos dessa dissertação foram desenvolvidos. E ainda por manter em pleno funcionamento o laboratório de computação GISC II (Grupo de Investigação de Sistemas Complexos II).

Ao Prof. Silvio da Costa Ferreira Jr. pela leitura de revisão.

À minha amada esposa Edilaine, pelo companheirismo, incentivo, por elevar minha autoestima, por me fazer sempre ver uma luz no fim do túnel e por me aturar nos momentos estressantes.

À CAPES pela bolsa concedida.

Ao CNPq e à FAPEMIG pelo apoio na aquisição dos equipamentos usados nas simulações.

Por fim agradeço a Deus pelo Dom da vida e por me possibilitar vivenciar todas essas coisas.

Sumário

Lista de Figuras	x
Resumo	xi
Abstract	xii
1 Introdução	1
2 Caracterização de Interfaces	4
2.1 Estruturas Fractais	4
2.2 Auto-similaridade e Auto-afinidade	5
2.3 Hipótese de Escala de Family-Vicsek	6
2.4 Equações Estocásticas e Classe de Universalidade	9
2.5 Barreiras nas Bordas de Degraus	12
2.6 Formação de Morros	14
2.7 Função de Correlação Altura-Altura	16
3 Modelos de Crescimento Discretos com Mobilidade Limitada	17
3.1 Deposição Aleatória	17
3.2 Deposição com Relaxação Superficial	19
3.3 Deposição Balística	21
3.4 Deposição com Recusa ou Modelo de Kim-Kosterlitz	23
3.5 Modelo de Wolf-Villain	25
3.6 Modelo de Das Sarma e Tamborenea	29

4	Efeito de uma Barreira Cinética em Modelos com Difusão Limitada	32
4.1	Implementação dos Modelos	33
4.2	Modelo WV	37
4.2.1	Simulações $d = 1 + 1$	37
4.2.2	Simulações $d = 2 + 1$	39
4.3	Modelo DT	44
4.3.1	Simulações $d = 1 + 1$	44
4.3.2	Simulações $d = 2 + 1$	46
5	Conclusões	51
A	Dedução da Regra da Barreira Cinética	52
	Referências Bibliográficas	55

Lista de Figuras

2.1	Construção de um objeto auto-afim determinístico.	6
2.2	Evolução temporal da rugosidade para o modelo EW e dependência da rugosidade e do tempo de saturação com o tamanho do sistema.	7
2.3	Ilustração do processo de colapso para as curvas da rugosidade mostradas na figura 2.2.	9
2.4	Ilustração de partículas livres sobre terraços.	13
2.5	Ilustração esquemática de uma seção transversal de um degrau numa superfície e o potencial associado com a difusão da partícula sobre o degrau.	14
2.6	Crescimento de Pt/Pt(111) a $167^{\circ}C$. Imagens obtidas de $259 \times 345 \text{ nm}^2$ por <i>STM</i> após 37.1 ML de material depositado. Figura retirada de referência [43].	15
2.7	A esquerda CdTe/Si(111) a $150^{\circ}C$ e $1\mu\text{m}$ de material depositado. A direita CdTe sobre vidro a $150^{\circ}C$ e $2.5\mu\text{m}$ numa área de $2\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$	15
2.8	Comportamento da função de correlação altura-altura para superfícies auto-afins e para superfícies com formação de morros.	16
3.1	Rugosidade para o modelo de deposição aleatória em $1 + 1d$	18
3.2	Ilustração do modelo de deposição aleatória com relaxação superficial.	19
3.3	Perfil de altura gerado para o modelo de deposição aleatória e para o modelo EW.	20
3.4	Rugosidade para o modelo EW em diferentes tamanhos de rede e colapso das curvas. Evolução da rugosidade e do tempo de saturação com o tamanho do sistema.	20
3.5	Esquema ilustrativo do modelo de deposição balística.	21
3.6	Perfis gerado no modelo de deposição balística.	22

3.7	Rugosidade para o modelo de deposição balística em diferentes tamanhos de rede e colapso das curvas. Evolução da rugosidade e do tempo de saturação com o tamanho do sistema.	23
3.8	Esquema ilustrativo do modelo KK, considerando $m = 1$	24
3.9	Rugosidade para o modelo KK em diferentes tamanhos de rede e colapso das curvas. Evolução da rugosidade e do tempo de saturação com o tamanho do sistema.	25
3.10	Ilustração do modelo de Wolf-Villain (WV).	26
3.11	Rugosidade e comprimento característico para o modelo WV em $1 + 1d$ e $2 + 1d$	27
3.12	Função de correlação altura-altura para o modelo WV em $1 + 1d$ e $2 + 1d$	28
3.13	Perfil do modelo WV em $1 + 1d$ e $2 + 1d$	28
3.14	Ilustração do modelo de Das Sarma e Tamborenea (DT).	29
3.15	Rugosidade e comprimento característico para o modelo DT em $1 + 1d$ e $2 + 1d$	30
3.16	Função de correlação altura-altura para o modelo DT em $1 + 1d$ e $2 + 1d$	30
3.17	Perfil gerado no modelo DT em $1 + 1d$ e $2 + 1d$	31
4.1	Ilustração de um degrau multicamadas ascendente e descendente, contendo $L + 1$ sítios.	33
4.2	Ilustração do Modelo WV generalizado com número de passos de difusão $n_s = 2$ em $1 + 1d$	34
4.3	Representação da vizinhança nas redes quadrada e triangular.	35
4.4	Evolução de regiões da interface para o modelo WV com e sem barreira cinética.	37
4.5	Função de correlação altura-altura para o modelo WV com barreira em $1 + 1d$	38
4.6	Rugosidade, comprimento característico e corrente para o modelo WV com barreira em $1 + 1d$	39
4.7	Morfologia das superfícies geradas pelo modelo WV com barreira em $2 + 1d$ na rede quadrada.	40
4.8	Morfologia das superfícies geradas pelo modelo WV com barreira em $2 + 1d$ na rede triangular.	41
4.9	Função de correlação altura-altura para o modelo WV com barreira em $2 + 1d$	42

4.10	Rugosidade e comprimento característico para o modelo WV com barreira em $2 + 1d$	43
4.11	Corrente para o modelo WV com barreira em $2 + 1d$	44
4.12	Evolução de regiões da interface para o modelo DT sem e com barreira cinética.	45
4.13	Função de correlação altura-altura para o modelo DT com barreira em $2 + 1d$ na rede quadrada.	45
4.14	Rugosidade, comprimento característico e corrente para o modelo DT com barreira em $1 + 1d$	46
4.15	Morfologia das superfícies geradas pelo modelo DT com barreira em $2 + 1d$ na rede quadrada.	47
4.16	Morfologia das superfícies geradas pelo modelo DT com barreira em $2 + 1d$ na rede triangular.	48
4.17	Função de correlação altura-altura para o modelo DT com barreira em $2 + 1d$ nas redes quadrada e triangular.	49
4.18	Rugosidade e comprimento característico para o modelo DT com barreira em $2 + 1d$	50
4.19	Corrente para o modelo DT com barreira em $2 + 1d$	50
A.1	Ilustração de uma rede discreta unidimensional contendo $L + 1$ sítios.	52
A.2	Ilustração de um degrau multicamadas ascendente contendo $L + 1$ sítios.	53
A.3	Ilustração de um degrau multicamadas descendente contendo $L + 1$ sítios.	54

Resumo

PEREIRA, Anderson de Jesus, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, Julho de 2012. **Efeito de uma barreira cinética em modelos de crescimento de interfaces com mobilidade limitada.** Orientador: Sidiney Geraldo Alves. Coorientadores: Silvio da Costa Ferreira Junior e Marcelo Lobato Martins.

No crescimento de filmes finos, a morfologia é uma das mais importantes características. Em particular, o aparecimento de estruturas tridimensionais auto-arranjadas, caracterizada por morros, com origem atribuída a barreiras que causam um desequilíbrio entre o fluxo de partículas ascendente e descendente em superfícies com degraus. Nessa dissertação estudamos os efeitos da introdução de uma barreira cinética que aparece quando incluímos a difusão normal ao substrato na migração entre planos diferentes nos modelos de Wolf-Villain (WV) e Das Sarma-Tamborenea (DT). O objetivo é investigar as alterações morfológicas e a dinâmica de crescimento de interfaces devido a essa barreira em substratos unidimensionais e bidimensionais. Em nossas simulações observamos interfaces com estruturas caracterizadas pela presença de morros, com padrões morfológicos típicos observados em filmes com estruturas tridimensionais auto-arranjadas o que não é observado para os modelos WV e DT, sem a barreira cinética. Nos modelos WV e DT com barreira cinética em $d = 1 + 1$ e $d = 2 + 1$ dimensões, encontramos que o expoente de crescimento β vai para $1/2$ no limite assintótico. Calculamos a corrente ascendente e descendente entre terraços e determinamos o fluxo médio de partículas nos degraus por sítio. Observamos uma corrente descendente nos degraus para ambos os modelos, que se aproxima de um valor nulo após um tempo longo, onde esperamos um equilíbrio entre o fluxo de partículas ascendentes e descendentes e além disso, a saturação da largura da interface.

Abstract

PEREIRA, Anderson de Jesus, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, July, 2012. **Effect of a kinetic barrier in limited mobility interface growth models.** Adviser: Sidiney Geraldo Alves. Co-Advisers: Silvio da Costa Ferreira Junior e Marcelo Lobato Martins.

In thin film growth, morphology is one of the most important characteristics. In particular, the appearance of self-assembled three-dimensional structures, characterized by mounds, with origin attributed to barriers that cause an imbalance between up- and downhill currents in stepped surfaces. In this dissertation we study the effects of the introduction of a kinetic barrier that appears when we include the normal diffusion to the substrate in the migration between different planes in the models of Wolf-Villain and Das Sarma-Tamborenea. The aim is to investigate the morphological changes and growth dynamics of interfaces due to this barrier in one and two-dimensional substrates. In our simulations, we observed interfaces with structures characterized by the presence of mounds, with typical morphological patterns observed in films with self-assembled three-dimensional structures, not observed for the WV and DT models without the kinetic barrier. In the WV and DT models with kinetic barrier in $d = 1 + 1$ and $d = 2 + 1$ dimensions, we find that the growth exponent β goes to $1/2$ in the asymptotic limit. We calculate the ascendent and descendent currents between terraces and determine the average flow of particles in steps per site. We observe a descendent current in the steps for both models, approaching a zero value after a long time, where we would expect a balance between upward and downward particle flow and also saturating the width interface.

Capítulo 1

Introdução

O desenvolvimento dos filmes finos foi um importante passo científico-tecnológico que possibilitou o desenvolvimento de dispositivos e estruturas inovadoras. Estes podem ser condutores, semicondutores e isolantes, normalmente crescidos termicamente ou depositados a partir da fase vapor. Dentre esses, os semicondutores tem se destacado devido ao vasto campo de utilização, como células fotovoltaicas, detectores de raio X, raios gama e infravermelho, além de dispositivos eletrônicos como transistores, diodos, lasers, chips usados em diversos aparelhos como microondas, rádios, televisores, telefones, calculadoras, computadores, etc. Vários materiais são utilizados na fabricação desses filmes, entre eles podemos citar GaAs, InAs, InP, GaN, Si, Ge, ZnSe, CdSe, ZnTe, PbTe, PbSe [1].

Dentre as diversas técnicas disponíveis para obtenção desses filmes, pode-se destacar a técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE-*molecular beam epitaxy*) que é reconhecida por produzir filmes de excelente qualidade. O sucesso dessa técnica se deve ao ajuste fino de diversos parâmetros importantes para o crescimento de um filme como a taxa de deposição, temperatura do substrato, dopagem e composição do filme, entre outros [2, 3, 4]. As condições de alto-vácuo e temperatura durante o processo de crescimento por MBE fazem com que o crescimento do filme ocorra longe do equilíbrio termodinâmico, e dessa forma os processos cinéticos na superfície do filme são os responsáveis pelo ordenamento atômico resultante, gerando interfaces com diversos arranjos morfológicos.

A morfologia, uma das mais importantes características na produção de filmes finos, é portanto diretamente influenciada por difusão [5, 6], deposição [7], temperatura [8, 9], entre outros fatores. Em particular, o aparecimento de estruturas tridimensionais auto-arranjadas, com morfologia caracterizada por morros tem sido observado durante o crescimento de uma ampla diversidade de filmes, por exemplo em metais [10, 11, 12], materiais semicondutores inorgânicos [9, 13] e orgânicos [14, 15], entre outros.

O surgimento dessas estruturas tridimensionais observadas durante o crescimento epitaxial é frequentemente associado à presença de barreiras nas bordas dos terraços dificultando a difusão entre camadas [16, 17]. A explicação para essa barreira é fundamentada na observação experimental na qual as partículas são refletidas nas bordas do terraço com mais frequência do que as partículas mudam para uma camada inferior.

Sabe-se que, para a obtenção de dispositivos com alta qualidade e eficiência, é necessária a utilização de filmes semicondutores com propriedades morfológicas adequadas. Isto tem motivado pesquisas que buscam desenvolver ferramentas que possibilitem a compreensão desses processos que ocorrem durante o crescimento. Existem diversos trabalhos teóricos [5, 6, 18, 19, 20] que propõem modelos computacionais de crescimento para investigar os mecanismos essenciais presentes durante o crescimento de filmes finos. Tais modelos buscam incorporar os fatores que influenciam o crescimento como, por exemplo, o tipo de substrato, a temperatura, a taxa de deposição, a difusão, a reevaporação das partículas, o tamanho do sistema e o tempo de crescimento com o objetivo de compreender melhor a dinâmica do processo de crescimento e as características das interfaces obtidas. Além disso, modelos computacionais permitem a análise estatística de um grande número de amostras, muitas vezes não praticáveis em laboratório. Permite também a observação imediata dos efeitos causados pelas alterações de parâmetros, cujo controle muitas vezes é de difícil acesso em experimentos.

Em estudos prévios, Leal e colaboradores investigaram o surgimento de estruturas tridimensionais auto-arranjadas em superfícies crescidas por MBE, através de simulações de Monte Carlo com difusão termicamente ativada. Leal *et al.* [21] sugeriram uma barreira cinética dependente explicitamente da altura dos degraus e em outro trabalho, Leal *et al.* [22] sugeriram uma barreira em degraus dependente do número de ligações entre primeiros vizinhos. Nesses trabalhos, estruturas tridimensionais auto-arranjadas foram obtidas com morfologia de morros com razão de aspecto (altura/largura) que podiam crescer ou diminuir com a temperatura, dependendo da intensidade da barreira do degrau.

Nesta dissertação, apresentamos um modelo computacional em que uma barreira cinética dependente da altura entre planos diferentes foi introduzida nos modelos de Wolf-Villain (WV) [23] e Das Sarma-Tamborenea (DT) [24]. Nosso objetivo consistiu na investigação computacional da morfologia de superfícies que apresentam estruturas tridimensionais caracterizadas por arranjos de morros. Mostramos que os modelos apresentados nesse trabalho (com exceção para o modelo DT com barreira em $d = 2 + 1$ dimensões) exibem a formação espontânea de arranjo de morros, com padrões morfológicos típicos observados em filmes finos com estruturas tridimensionais auto-arranjadas, o que não é observado para os modelos WV e DT originais, sem a barreira cinética.

A dissertação é dividida como segue. No capítulo 2, apresentamos uma descrição das ferramentas matemáticas usadas na caracterização da dinâmica de crescimento das interfaces, como

a função que descreve a rugosidade, a função de correlação altura-altura e algumas noções das equações estocásticas e dos expoentes que determinam a classe de universalidade do modelo. Além disso, ainda neste capítulo, descrevemos a barreira de potencial de Ehrlich-Schwoebel (ES) que levam a instabilidades na caminhada das partículas e a formação de morros. No capítulo 3, apresentamos alguns modelos discretos de crescimento encontrados na literatura, para auxiliar o entendimento das ferramentas descritas no capítulo 2. Em particular, apresentamos os modelos desenvolvidos por Wolf-Villain (WV) e Das Sarma Tamborenea (DT) que foram os primeiros modelos a simular crescimento de filmes finos. No capítulo 4, apresentamos a nova regra para difusão entre camadas implementada nos modelos WV e DT e os resultados encontrados. No capítulo 5, concluímos o trabalho e apresentamos perspectivas para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Caracterização de Interfaces

2.1 Estruturas Fractais

A natureza é rica em formas geométricas que vão das mais simples com padrões descritos em termos da geometria euclidiana às mais complexas, normalmente descritas usando a geometria fractal. Retas, quadrados, círculos, pirâmides, cones, cilindros, etc, descrevem as formas geométricas de diversos objetos observados na natureza e a ideia da dimensão desses objetos já está em nossas mentes. Pode-se medir o comprimento, a área e o volume e até construir verdadeiras obras de arte a partir dessas formas geométricas, como os grandes edifícios projetados por engenheiros e arquitetos.

Outras formas geométricas, como as formas das nuvens, dos contornos das montanhas, dos arquipélagos e dos litorais costeiros, das formações dendríticas de neurônios, dentre outras, possuem superfícies que apresentam irregularidades em uma ampla faixa de escala de comprimento, com formas geométricas que dependem do comprimento de escala de observação.

Para descrever estas diversas formas presentes na natureza, foi introduzido por Benoit Mandelbrot [25] a geometria fractal. A afirmação, uma parte se parece com o todo, implica na existência de uma mudança de escala isotrópica (mesmo fator de escala em cada direção do espaço) que ao ser aplicada a uma parte do objeto resultará em um novo objeto semelhante ao original. Objetos que apresentam essa propriedade são denominados objetos auto-similares.

Os objetos fractais podem ser descritos em termos de uma dimensão normalmente não inteira denominada dimensão fractal. Ela pode ser definida usando o método denominado *box-counting*, que conta o número mínimo $N(\ell)$ de hipercubos d -dimensionais com comprimento da face igual a ℓ necessários para cobrir o objeto. A dimensão d_f é então definida como

$$d_f = \lim_{\ell \rightarrow 0} \frac{\ln N(\ell)}{\ln(1/\ell)}. \quad (2.1)$$

2.2 Auto-similaridade e Auto-afinidade

Auto-similaridade é uma propriedade de simetria do sistema indicando invariância sob uma transformação isotrópica. Existem processos de crescimento que levam a estruturas complexas e possuem irregularidades em diferentes escalas de observação, que diferentemente dos objetos auto-similares, necessitam de transformações de escala anisotrópicas, ou seja, de diferentes transformações para cada direção do espaço, para manter suas propriedades invariantes. Os objetos que possuem essa característica são denominados auto-afins.

No estudo de superfícies estaremos frequentemente lidando com estruturas descritas por funções que apresentam auto-afinidade, com transformações de escala do tipo

$$h(x) \sim b^{-H} h(bx), \quad (2.2)$$

em que b é um fator de escala e H é o expoente de Hurst. De acordo com a equação 2.2, se a coordenada x é reescalada por um fator arbitrário b então a altura h deve ser reescalada por um fator b^H para produzir um perfil com as mesmas propriedades estatísticas da curva original. Superfícies auto-similares têm os mesmos fatores de escala e, portanto, $H = 1$. Para superfícies auto-afins tem-se $0 < H < 1$.

Um exemplo de um objeto auto-afim que pode ser construído recursivamente é mostrado na figura 2.1. Partimos da diagonal de um retângulo de comprimento 4ℓ e altura 2ℓ e a cada passo k substituímos os segmentos de comprimento $\ell/4^k$ pela estrutura mostrada na figura 2.1(b). Podemos calcular o expoente de Hurst desse objeto, notando que para recuperarmos a figura 2.1(b) a partir do trecho destacado na figura 2.1(c), devemos fazer as seguintes transformações de escala

$$x \rightarrow x' = b_{\parallel} x \quad \text{e} \quad h \rightarrow h' = b_{\perp} h \quad (2.3)$$

com $b_{\parallel} = 4$ e $b_{\perp} = 2$. Da equação 2.2 temos $b_{\parallel} = b$ e $b_{\perp} = b^H$. Logo, $b_{\perp} = b_{\parallel}^H$ e

$$H = \frac{\ln 2}{\ln 4} = \frac{1}{2} \quad (2.4)$$

e o sistema é auto-afim.

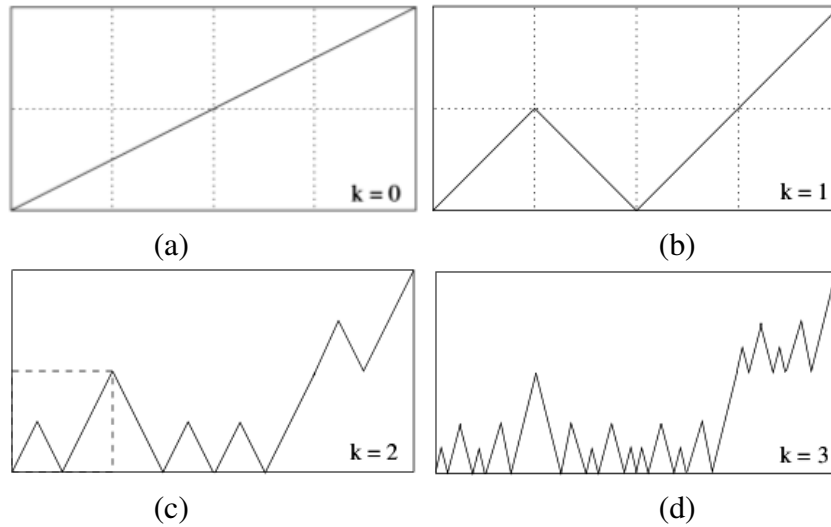


Figura 2.1: Construção de um objeto auto-afim determinístico. Figura retirada da referência [26]

2.3 Hipótese de Escala de Family-Vicsek

Em modelos discretos de deposição de partículas, a interface é caracterizada pelo perfil de alturas que evoluem no tempo, formado pelas partículas localizadas na parte superior de cada coluna do agregado. Dessa forma, quando se tem interesse em caracterizar a dinâmica de formação de interfaces com perfis auto-afins, a noção de invariância de escala é estendida para a dimensão temporal e os perfis são reescalados da seguinte forma

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

em que x é a posição do sítio, t é o tempo e z é denominado expoente dinâmico.

Uma quantidade usual para caracterização de superfícies é a medida da largura da interface W , definida pelo desvio padrão das alturas

$$W(L, t) = \langle ([h(x, t) - \bar{h}(t)]^2)^{1/2} \rangle, \quad (2.6)$$

em que a barra superior denota uma média dos desvios $h(x, t) - \bar{h}(t)$ sobre todas as posições, $\bar{h}(t)$ é a média sobre diferentes alturas e $\langle \dots \rangle$ denota a média sobre as diferentes amostras. Em geral, assumimos uma condição inicial com interface plana, definida por $h(x, t = 0) = 0$ e, portanto, com rugosidade nula. Como pode ser visto na figura 2.2, a medida que as partículas são depositadas, a rugosidade da interface exibe dois regimes distintos separados por um tempo denominado tempo de saturação t_{sat} .

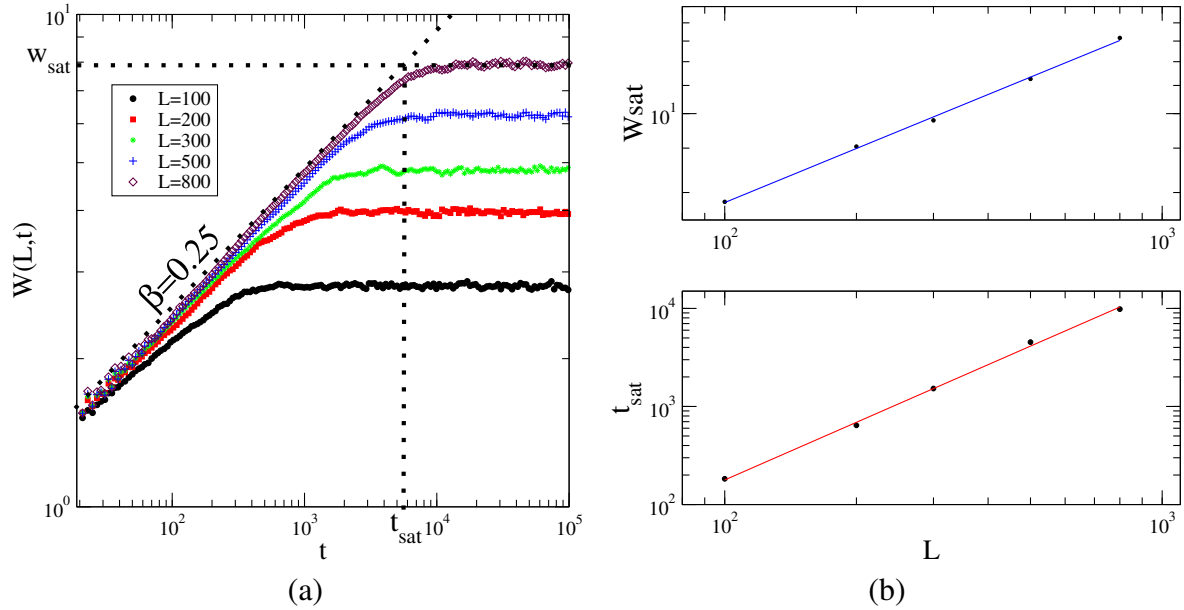


Figura 2.2: (a) Evolução da rugosidade em função do tempo para diferentes tamanhos do sistema, $L = 100; 200; 300; 500; 800$ em $d = 1 + 1$ dimensões para o modelo de deposição com relaxação superficial, que será apresentado no capítulo seguinte. (b) Dependência da rugosidade e do tempo de saturação com o tamanho L do sistema, e ajustes em lei de potência que fornecem os expoentes de rugosidade $\alpha = 0.50(2)$ e dinâmico $z = 2.0(2)$, respectivamente.

Inicialmente, para $t \ll t_{sat}$ a rugosidade aumenta como lei de potência dada por

$$W(L, t) \sim t^\beta, \quad (2.7)$$

em que o expoente β é chamado de expoente de crescimento. Para $t \gg t_{sat}$, o regime de crescimento cede lugar a um de saturação quando a rugosidade alcança um valor estacionário w_{sat} , ou seja

$$W(L, t) \simeq w_{sat}. \quad (2.8)$$

Este valor estacionário w_{sat} pode ser estimado conforme mostrado na figura 2.2(a). Em 2.2(b) observa-se que w_{sat} é função do tamanho L da rede com uma lei de potência dada por

$$w_{sat} \sim L^\alpha, \quad (2.9)$$

em que α é denominado expoente de rugosidade global.

De forma semelhante, estima-se o valor t_{sat} , que também depende do tamanho L da rede e segue uma lei de potência dada por

$$t_{sat} \sim L^z, \quad (2.10)$$

com z denominado expoente dinâmico.

A dinâmica da evolução temporal da rugosidade é explicada definindo um comprimento de correlação lateral ξ_{\perp} (perpendicular à direção de crescimento da interface) que cresce em lei de potência dada por

$$\xi_{\perp} \sim t^{1/z}, \quad (2.11)$$

e define a distância de influência das alturas de sítios vizinhos em relação a um sítio de referência. No início do processo de deposição, há pouca correlação entre os sítios da rede. Porém, à medida em que o processo de deposição avança, um aumento do comprimento de correlação é observado.

Para um sistema finito, o comprimento de correlação ξ_{\perp} não pode crescer indefinidamente, porque está limitado pelo tamanho do sistema. Quando ele atinge o tamanho do sistema, a interface inteira torna-se correlacionada, resultando na saturação da rugosidade.

Na figura 2.3 obtemos o colapso dos dados da figura 2.2(a). Usando as relações 2.8, 2.9 e 2.10 traçamos $W(L, t)/L^{\alpha}$ como função de t/L^z de modo que retiramos a dependência em L da rugosidade e do tempo de saturação. As curvas passam a saturar no mesmo valor e no mesmo tempo característico. Portanto, $W(L, t)/w_{sat}$ é função de t/t_{sat} , ou seja,

$$\frac{W(L, t)}{w_{sat}} = f\left(\frac{t}{t_{sat}}\right) \quad (2.12)$$

em que $f(x)$ é uma função de escala com $x = t/t_{sat}$. De fato, usando as equações 2.9 e 2.10 encontramos a relação de escala de Family-Vicsek [27]

$$W(L, t) = L^{\alpha} f\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (2.13)$$

A forma de $f(x)$ é evidenciada na figura 2.3 na qual podem ser identificados uma lei de potência para $x \ll 1$ e saturação para $x \gg 1$. Assim, a forma apropriada para a função de escala é

$$f(x) \sim \begin{cases} x^{\beta} & \text{para } x \ll 1 \\ const. & \text{para } x \gg 1 \end{cases} \quad (2.14)$$

A partir dessa relação obtemos a conexão entre os expoentes α , β e z . Ao aproximarmos do

ponto de *crossover* (t_{sat}, w_{sat}) pela esquerda na figura 2.2(a) e usando 2.7 e 2.10 encontramos que

$$W(t_{sat}) \sim t_{sat}^{\beta} \sim L^{\beta z}. \quad (2.15)$$

Pela direita, usando 2.9 obtemos

$$W(t_{sat}) \sim L^{\alpha}. \quad (2.16)$$

Das relações 2.15 e 2.16 concluímos que

$$z = \frac{\alpha}{\beta}, \quad (2.17)$$

é válida para qualquer processo de crescimento que obedeça a relação de escala 2.13.

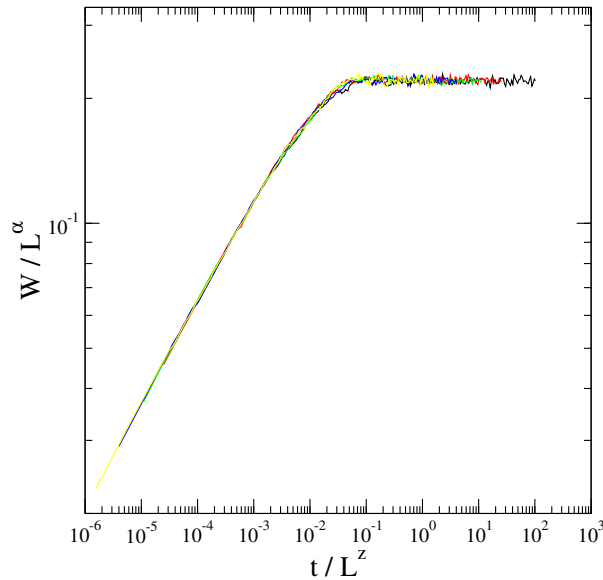


Figura 2.3: Ilustração do processo de colapso para as curvas da rugosidade mostradas na figura 2.2.

2.4 Equações Estocásticas e Classe de Universalidade

Uma importante abordagem dada ao crescimento de interfaces é aquela que procura associá-lo a equações diferenciais estocásticas. Cada termo da equação estocástica deve ser relacionado a processos físicos presentes durante a evolução da interface. Além disso, o termo dominante

define uma classe de universalidade, caracterizada pelos expoentes β , α e z . Observa-se que regras de deposição distintas, podem apresentar um mesmo conjunto de expoentes, que definem uma mesma classe de universalidade. A razão para isso é que os expoentes que caracterizam a universalidade não dependem de detalhes microscópicos do sistema e sim de características gerais tais como dimensão e simetrias do sistema [28].

As equações estocásticas podem ser construídas através de argumentos físicos e/ou princípios de simetria. De forma geral, podemos escrever as equações como

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = F(\vec{x}, h, t) + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.18)$$

em que $h(\vec{x}, t)$ é a função que representa o perfil de alturas da interface, $F(\vec{x}, h, t)$ é uma função geral que apresenta os termos associados aos argumentos físicos e/ou princípios de simetria e $\eta(\vec{x}, t)$ é um termo de ruído branco, responsável pelas flutuações aleatórias no fluxo de partículas, apresentando valor médio nulo e ausência de correlações espaço-temporais,

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \rangle = 0, \quad (2.19)$$

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle = 2D\delta^d(\vec{x} - \vec{x}')\delta(t - t'), \quad (2.20)$$

em que $\delta^d(\vec{x} - \vec{x}')$ são funções delta, D é uma constante e d a dimensão.

Fazendo $F(\vec{x}, h, t) = 0$ na equação 2.18 obtemos a forma mais simples que descreve um processo de crescimento aleatório, onde não há correlação entre o sítio de deposição e seus vizinhos,

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \eta(\vec{x}, t). \quad (2.21)$$

Resolvendo essa equação diferencial usando 2.19 e 2.20 obtemos o expoente de crescimento $\beta = 1/2$. Como não há correlações no sistema, a rugosidade da interface cresce indefinidamente.

Em modelos de crescimento que possuem correlações laterais, como o modelo de deposição com relaxação, a ser discutido na seção 3.2, a forma de $F(\vec{x}, h, t)$ pode ser construída considerando argumentos físicos, e em alguns casos, princípios de simetria. A equação proposta por Edwards e Wilkinson (EW) [29] é a forma mais simples para o processo de relaxação no crescimento de interfaces, respeitando os princípios de invariância sob translações temporais, translações ao longo da direção normal e perpendicular ao crescimento, rotação e inversão ($h \rightarrow -h$),

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t). \quad (2.22)$$

Como a equação EW é linear, temos que os expoentes α , β e z podem ser calculados exatamente, através de uma análise de Fourier [20]. Como forma alternativa e mais simples, podemos

explorar a auto-afinidade da superfície, fazendo as seguintes transformações de escala

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = b\vec{x}, \quad t \rightarrow t' = b^z t \quad e \quad h \rightarrow h' = b^\alpha h. \quad (2.23)$$

Substituindo as equações 2.23 em 2.22 e usando a equação 2.20 e a propriedade da função delta

$$\delta^d(a\vec{x}) = a^{-d}\delta^d(\vec{x}), \quad (2.24)$$

obtemos

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu b^{z-2}\nabla^2 h(\vec{x}, t) + b^{-d/2+z/2-\alpha}\eta(\vec{x}, t). \quad (2.25)$$

Como a equação deve ser invariante segundo estas transformações, os expoentes dos coeficientes de b devem ser todos nulos, logo obtemos

$$\beta = \frac{2-d}{4}, \quad \alpha = \frac{2-d}{2} \quad e \quad z = 2. \quad (2.26)$$

Os expoentes obtidos caracterizam a classe de universalidade EW.

Outro processo que pode ocorrer durante o crescimento de interfaces é o crescimento normal (ou ortogonal) ao substrato, fazendo com que termos não lineares sejam adicionados à equação de EW, afim de que expoentes corretos sejam obtidos. Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [30] estudaram tais processos e propuseram a equação

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu\nabla^2 h(\vec{x}, t) + \lambda(\nabla h(\vec{x}, t))^2 + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.27)$$

que representa uma generalização da equação de EW com a inclusão de um termo não linear. Argumentos de escala falham na obtenção dos expoentes da equação KPZ e, além disso, devido a sua não linearidade, a equação não pode ser resolvida por análise de Fourier. No entanto, utilizando técnicas de grupo de renormalização [31] pode-se obter os expoentes de escala em uma dimensão ($d = 1 + 1$), e são eles

$$\beta = 1/3, \quad \alpha = 1/2 \quad e \quad z = 3/2. \quad (2.28)$$

Resultados numéricos em $d = 2 + 1$ dimensões indicam $\beta \approx 1/3$, $\alpha \approx 1/2$ e $z \approx 1.67$ [20].

Em processos com deposição e difusão de partículas há movimento em direções paralelas aos substrato, gerando uma corrente $j(\vec{x}, t)$, também paralela à superfície. Uma equação proposta para descrever este mecanismo é a equação de Mullins-Herring (MH) [32] dada por

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = -k\nabla^4 h(\vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t). \quad (2.29)$$

Esta equação foi a primeira candidata a descrever os processos de crescimento envolvidos em experimentos como o MBE [23, 24, 33]. Para obter os expoentes de escala, podemos novamente usar argumentos de escala. Para o ruído, considerando as equações 2.20, 2.23, 2.24 obtemos:

$$\langle \eta(b\vec{x}, b^z t) \eta(b\vec{x}', b^z t') \rangle = 2D\delta^d(b\vec{x} - b\vec{x}')\delta(b^z t - b^z t') = b^{-d-z} \langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle. \quad (2.30)$$

Reescalando os outros termos da equação 2.29 de acordo com 2.23 temos:

$$\frac{\partial h'(\vec{x}', t')}{\partial t'} = b^{\alpha-z} \frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} \quad (2.31)$$

$$\nabla^4 h'(\vec{x}', t') = b^{\alpha-4} \nabla^4 h(\vec{x}, t), \quad (2.32)$$

de onde obtemos a equação MH reescalada

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = -k b^{z-4} \nabla^4 h(\vec{x}, t) + b^{(z-d-2\alpha)/2} \eta(\vec{x}, t), \quad (2.33)$$

e os expoentes que caracterizam a classe de universalidade MH

$$\beta = \frac{4-d}{8}, \quad \alpha = \frac{4-d}{2} \quad e \quad z = 4. \quad (2.34)$$

O termo $\nabla^2(\nabla h(\vec{x}, t))^2$ corresponde à situação em que partículas se deslocam de um local da superfície com maior inclinação para menor. Introduzindo esse termo na equação de MH, Villain, Lai e Das Sarma (VLDS) [33, 34] propuseram um modelo que resulta na equação,

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = -k \nabla^4 h(\vec{x}, t) + \lambda \nabla^2 (\nabla h(\vec{x}, t))^2 + \eta(\vec{x}, t). \quad (2.35)$$

Villain [34] mostrou que o termo $-k \nabla^4 h(\vec{x}, t)$ dominará em pequenas escalas de tempo, o que significa que α e β permanecerão os mesmos que os da equação MH, entretanto, o termo não linear dominará e α e β mudarão, respectivamente para $2/3$ e $1/5$ em $d = 2 + 1$, 1 e $1/3$ em $d = 1 + 1$ dimensões.

2.5 Barreiras nas Bordas de Degraus

É observado em diversas técnicas de crescimento de cristais que, em geral, as superfícies se apresentam rugosas, devido à flutuações no feixe das partículas oriundas das fontes e, principal-

mente, devido à instabilidades cinéticas. A presença de degraus (descontinuidade dos terraços), ver figura 2.4, influenciam no processo de difusão e causam instabilidades que podem produzir grandes estruturas em superfícies altamente regulares. Uma causa fundamental de instabilidade é a denominada barreira de Ehrlich-Schowobel (ES) [16, 17] que dificulta a difusão entre camadas. Experimentos mostram que uma partícula depositada sobre um terraço inferior que encontra um degrau, exibe uma preferência em ligar-se a ele. O mesmo não é observado quando uma partícula se aproxima da borda difundindo-se pelo terraço superior. Ao aproximar-se dele, a partícula é refletida, gerando uma tendência de movimento para o interior.

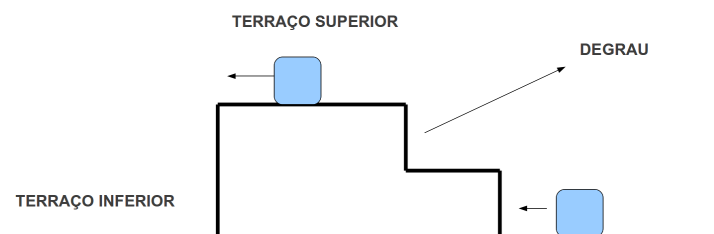


Figura 2.4: Ilustração de partículas livres sobre terraços. A partícula à esquerda aproxima-se da borda de um terraço superior onde encontra uma barreira de potencial.

A presença dessa barreira pode ser compreendida por meio de uma representação esquemática de um modelo microscópico simples, ilustrado na figura 2.5. No quadro (a) dessa figura, observamos que para a partícula (representada pelo círculo pontilhado) descer o degrau, ela deve romper a ligação com a partícula à esquerda e passar por uma região com poucas coordenações, onde não há uma partícula à direita que auxilie no processo de difusão. A ausência dessa partícula à direita da borda ocasiona um aumento e uma assimetria no potencial da rede (quadro (b)) e gera uma probabilidade maior dela se mover para a esquerda do que para a direita. Se a partícula possui energia suficiente para vencer essa barreira de potencial, ela saltará para a camada inferior e formará três ligações com seus vizinhos, (quadro (c)) correspondendo ao potencial mínimo da rede representado no quadro (d).

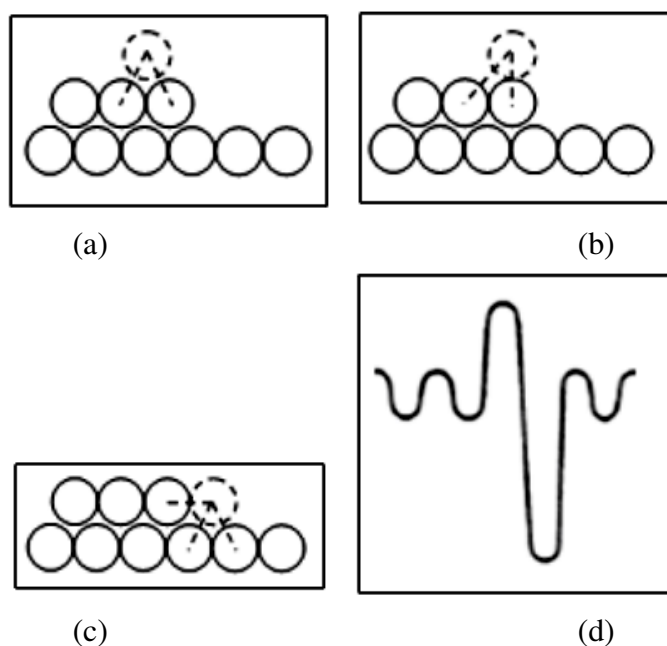


Figura 2.5: Ilustração esquemática de uma seção transversal de um degrau numa superfície e o potencial associado com a difusão da partícula sobre o degrau. Figura retirada de referência [20]

2.6 Formação de Morros

A existência da barreira de potencial ES nas bordas dos degraus causa instabilidades nas caminhadas das partículas, levando a desestabilização do crescimento camada por camada e a formação de morros [34], caracterizados por estruturas tridimensionais auto-arranjadas, com arranjos (quase) periódicos e regulares. O mecanismo que causa essa instabilidade é facilmente compreendido. Como uma partícula tem sua difusão dificultada através da borda de um degrau para uma camada mais baixa, a probabilidade dela permanecer na mesma camada ou em uma superior, é maior. Isso gera um fluxo médio de átomos no terraço com sentido ascendente - migração para os terraços superiores. Essas correntes ascendentes desestabilizam uma superfície lisa, e conseqüentemente, pequenas flutuações de alturas são amplificadas por essa corrente na superfície. Esta instabilidade, conhecida como instabilidade de Villain [34], foi alvo de intensas pesquisas sendo observada em um número considerável de estruturas tanto experimentais [35, 36, 37, 38, 39], quanto de simulações computacionais [21, 40, 41, 42].

A morfologia de morros que se observa nos experimentos é uma forte indicação da existência e relevância das barreiras ES. Na figura 2.6 mostramos a formação de morros, depois da deposição

de 37.1 ML de Pt sobre Pt(111) por Epitaxia de paredes quentes (*Hot Wall*) a uma temperatura de 167°C . As estruturas de Pt possuem base hexagonal e orientação (111). Na figura 2.7 mostramos dois exemplos de estruturas tridimensionais auto-arranjadas obtidas com material semiconductor em heteroepitaxia. À esquerda, Ferreira *et al* [38] depositam CdTe sobre Si(111) a uma temperatura de 150°C . As estruturas de CdTe possuem base triangular e orientação (111). À direita, Ferreira *et al*[39] depositam CdTe sobre material amorfo, (vidro) e os morros formados têm características estruturais bem próximas àqueles de crescimento sobre Si(111).

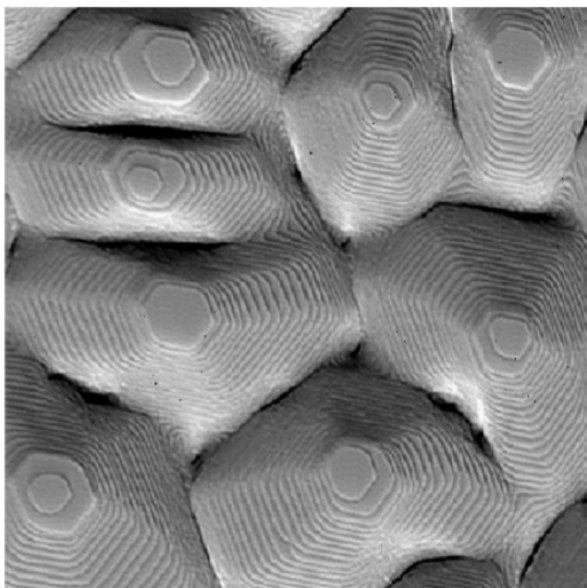


Figura 2.6: Crescimento de Pt/Pt(111) a 167°C . Imagens obtidas de $259 \times 345 \text{ nm}^2$ por STM após 37.1 ML de material depositado. Figura retirada de referência [43].

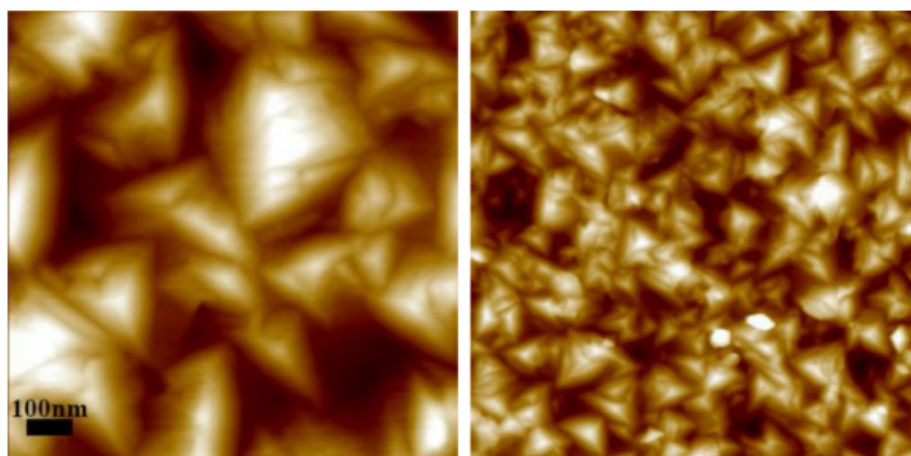


Figura 2.7: A esquerda CdTe/Si(111) a 150°C e $1 \mu\text{m}$ de material depositado. A direita CdTe sobre vidro a 150°C e $2.5 \mu\text{m}$ numa área de $2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$. Figuras retiradas das referências [38, 39], respectivamente.

2.7 Função de Correlação Altura-Altura

Uma quantidade básica usada para a caracterização da dinâmica de formação de morros em superfícies é a função de correlação altura-altura [44] definida como

$$\langle C(r, t) \rangle = \langle \tilde{h}(x+r, t) \tilde{h}(x, t) \rangle_x, \quad (2.36)$$

em que $\langle \dots \rangle \equiv$ média sobre amostras, $\tilde{h}(x, t)$ é medido em relação a altura média da superfície, ou seja, $\tilde{h}(x, t) = h(x, t) - \bar{h}(t)$ e $\langle \dots \rangle_x$ representa a média sobre a superfície. A largura da interface é dada por $w = \sqrt{C(0)}$ e o primeiro zero de $C(r)$, denotado por ξ , é um comprimento característico da superfície, que mede em média a largura dos morros presentes na interface.

Para superfícies auto-afins $C(r)$ apresenta comportamento monotonicamente decrescente com r , como ilustrado na figura 2.8 (a). Quando as superfícies são interfaces caracterizadas pela presença de morros (figura 2.8 (b)), $C(r)$ apresenta inicialmente um rápido decaimento, porém para $C(r) > \xi$ o comportamento passa a ser oscilatório em torno de $C(r) = 0$, e o primeiro máximo de $C(r)$ fornece a distância média entre os morros, \bar{d} .

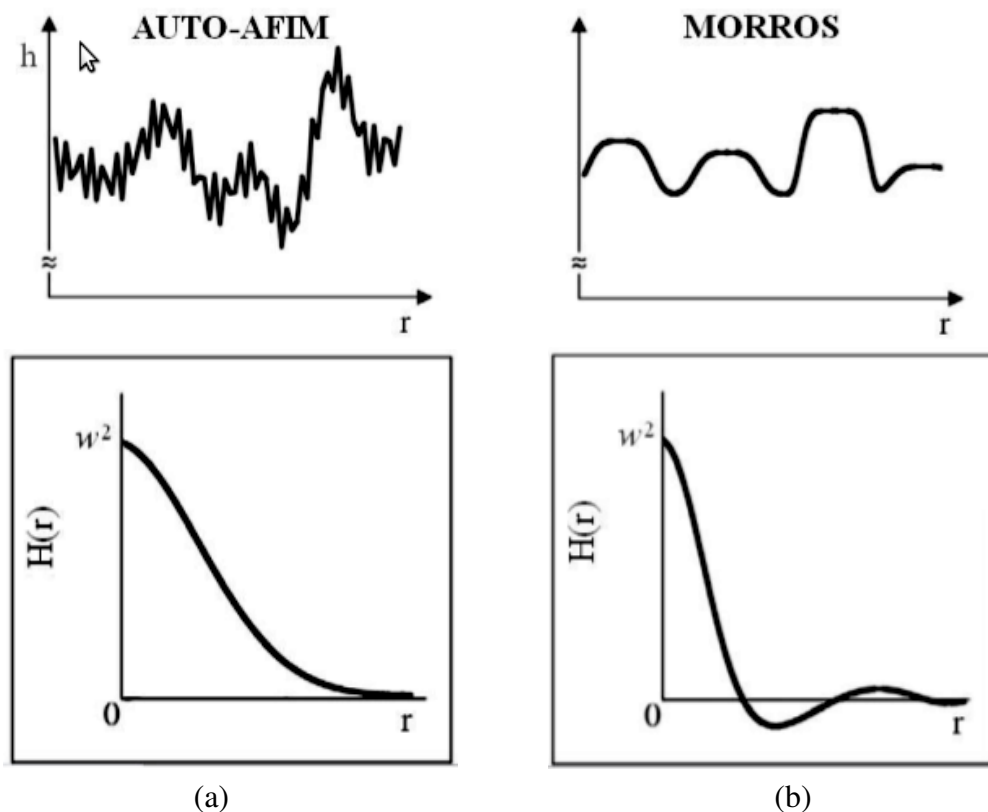


Figura 2.8: Em (a) mostramos o comportamento da função de correlação altura-altura para superfícies auto-afins e em (b) para superfícies com formação de morros. Figuras retiradas de referência [6].

Capítulo 3

Modelos de Crescimento Discretos com Mobilidade Limitada

Nesse capítulo descreveremos alguns dos principais modelos de crescimento de interfaces encontrados na literatura. Tais modelos procuram reproduzir algumas características relevantes de processos que ocorrem durante o crescimento de superfícies através de regras tão simples quanto possível.

Em um algoritmo de simulação computacional o substrato é representado por uma rede em d dimensões com L^d sítios e condições de contorno periódicas. A altura do sítio i , num dado instante t é representada pela variável $h_i(t)$ e a unidade de tempo é contada quando se realiza L^d sorteios, ou seja, após a deposição (ou tentativa de deposição) de uma monocamada.

3.1 Deposição Aleatória

O modelo de deposição aleatória é o mais simples de ser implementado. A simplicidade deste modelo nos permite exemplificar a associação entre o modelo discreto de crescimento e sua equação estocástica contínua, que resolvidos geram os mesmos expoentes.

Nesse modelo, uma posição é escolhida aleatoriamente sobre o substrato, especificando o sítio onde a partícula será depositada. Estas fixam-se ao sítio escolhido, ou seja, apenas acrescentando em 1 a altura do sítio.

As alturas das colunas crescem independentemente uma das outras. Isto faz com que o sistema seja totalmente descorrelacionado, e dessa forma, a rugosidade da interface cresce indefinidamente, nunca alcançando um valor estacionário, conforme discutido na seção 2.3. Os valores dos expoentes α (expoente de rugosidade) e z (expoente dinâmico) não são definidos

para este modelo.

A solução exata do modelo é dada pela distribuição binomial

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

$P(h, N)$ fornece a probabilidade de que a altura de um sítio seja h , após a deposição de N partículas. A altura média cresce linearmente no tempo,

$$\langle h \rangle = \sum_h h P(h, N) = Np = t \quad (3.2)$$

em que $t = N/L$, e $p = 1/L$ representa a probabilidade de que o sítio i do substrato seja sorteado para receber a partícula. Para o segundo momento temos

$$\langle h^2 \rangle = \sum_h h^2 P(h, N) = Np(1-p) + N^2 p^2 \quad (3.3)$$

A largura da interface pode ser escrita em termos dos momentos usando

$$W^2(t) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{N} (h_i - \langle h \rangle)^2 = \langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 = Np(1-p) = \frac{N}{L} \left(1 - \frac{1}{L}\right) \quad (3.4)$$

Usando $t = N/L$, de 3.4 nós temos que $W(t) \simeq t^{1/2}$, logo $\beta = 1/2$.

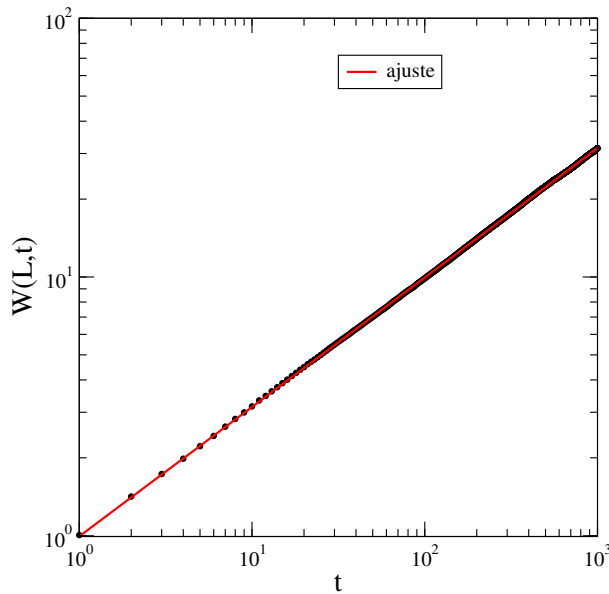


Figura 3.1: Gráfico da evolução temporal da rugosidade indicando o expoente de crescimento $\beta = 0.5001(3)$ em $d = 1 + 1$ dimensões para um sistema de tamanho linear $L = 500$ com média feita sobre 100 amostras.

3.2 Deposição com Relaxação Superficial

Na seção anterior, vimos que o modelo de deposição aleatória é um processo completamente decorrelacionado. Se nesse modelo permitimos uma relaxação superficial, ou seja, que a partícula procure um mínimo local dentre os primeiros vizinhos do sítio, estaremos introduzindo correlações laterais no sistema, pois agora a fixação da partícula vai depender da altura de seus primeiros vizinhos. Esse modelo, conhecido como deposição aleatória com relaxação superficial (DARS), foi apresentado por Family [45] em 1986 como uma representação simplificada de processos de deposição de vapor em substratos a baixas temperaturas. Esse modelo permite que partículas que não estão em posições energeticamente favoráveis realizem uma relaxação superficial.

Na figura 3.2 ilustramos as regras de crescimento do modelo DARS. Um sítio i é sorteado sobre o substrato onde ocorre a deposição da partícula. Se o sítio sorteado for um mínimo local, ou se as alturas dos primeiros vizinhos forem iguais ($h_i = h_{i-1} = h_{i+1}$), a partícula é fixada imediatamente; caso contrário, permitimos que ela relaxe, procurando a posição de menor altura dentre os primeiros vizinhos do sítio sorteado ($i - 1, i + 1$).

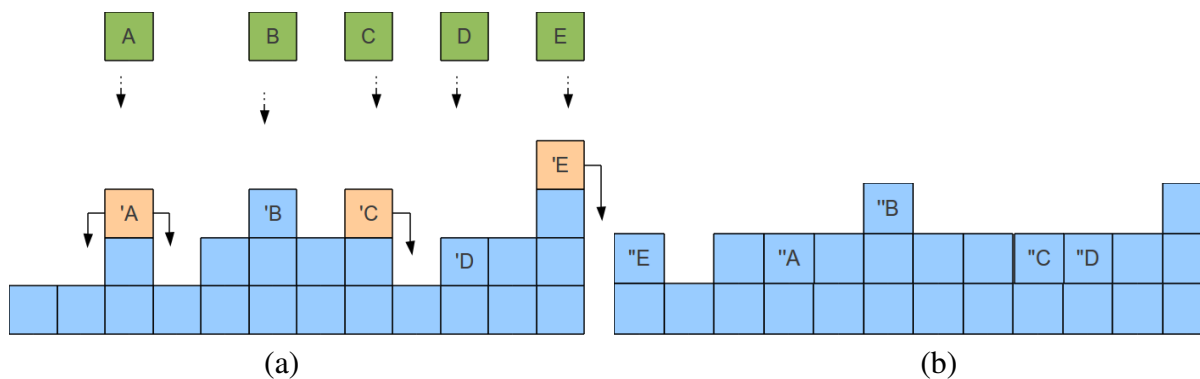


Figura 3.2: Esquema ilustrativo do modelo de deposição aleatória com relaxação superficial. (a) 'A, 'B, 'C, 'D e 'E são as partículas A, B, C, D e E já depositadas. Note que 'A, 'C e 'E irão procurar um mínimo local. 'A possui igual chance de ir para esquerda ou direita. Os vizinhos de 'E são os sítios $L + 1$ e $L - 1$, com o sítio $L + 1$ igual ao sítio 1 pela condição de contorno. (b) "A, "B, "C, "D e "E são as partículas A, B, C, D e E já fixadas a interface.

A introdução das correlações laterais fazem com que a rugosidade não cresça indefinidamente como no caso anterior. Ela atinge um regime de saturação e, além disso, o perfil da interface é mais suave, o que pode ser observado comparando as figuras 3.3(a) e (b). A evolução temporal da rugosidade para o modelo de Family em $d = 1 + 1$ pode ser observada na figura 3.4(a), na qual dois intervalos de tempos podem ser destacados: $t \ll t_{sat}$ no qual a rugosidade cresce obedecendo a lei de potência com expoente de crescimento $\beta = 0.25(2)$ e $t \gg t_{sat}$

onde as correlações laterais levam a saturação da rugosidade do sistema. Podemos observar também que a rugosidade e o tempo de saturação, W_{sat} e t_{sat} , aumentam à medida em que aumentamos o tamanho L da rede. O gráfico na inserção da figura 3.4(b) mostra a dependência de ambos em relação ao tamanho do sistema, cujas inclinações fornecem o expoente de rugosidade $\alpha = 0.50(2)$ e o expoente dinâmico $z = 2.0(2)$, respectivamente. Com os valores de α e z , usando a equação 2.13 mostramos na figura principal 3.4(b) o colapso das curvas da figura 3.4(a) para os diferentes tamanhos do sistema. O comportamento da rugosidade obedece à relação de escala de Family-Vicsek e os valores obtidos para os expoentes α , β e z estão de acordo com valores encontrados em outros trabalhos [27, 46, 47].

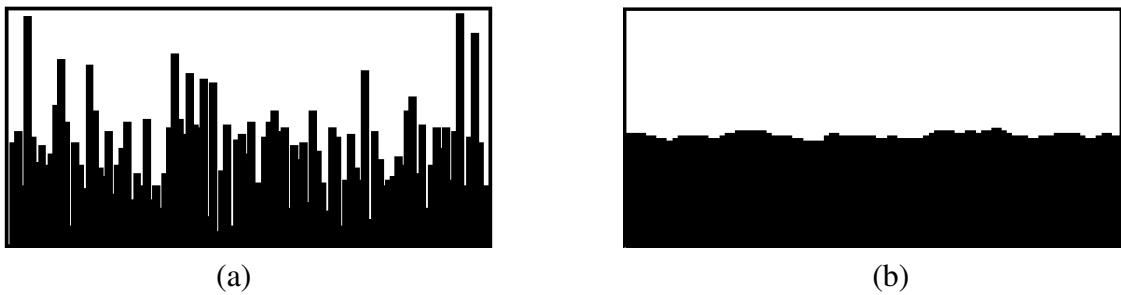


Figura 3.3: (a) Perfil gerado para deposição aleatória e (b) para deposição aleatória com relaxação das partículas em redes de tamanho $L = 100$ após $t = 200$ passos de tempo.

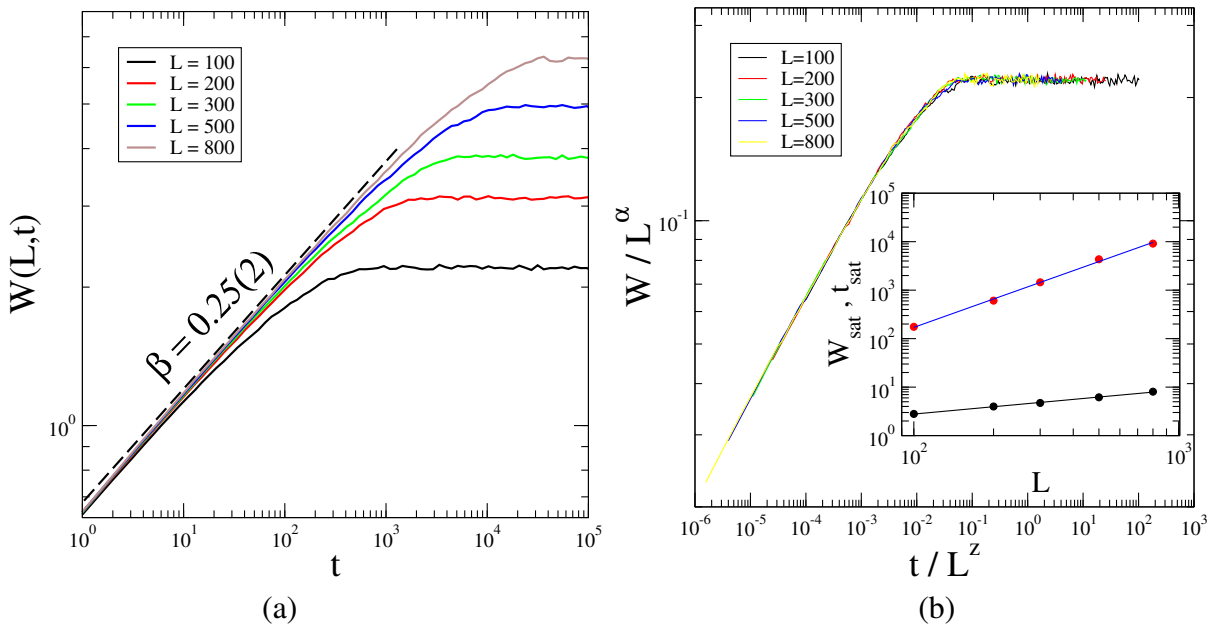


Figura 3.4: (a) Evolução da rugosidade em função do tempo para diferentes tamanhos de sistema, $L = 100; 200; 300; 500; 800$ em $d = 1 + 1$ dimensões com média sobre 300 amostras. (b) Colapso das curvas mostradas em (a) usando $\alpha = 0.50(2)$ e $z = 2.0(2)$. No destaque mostramos a dependência da rugosidade e do tempo de saturação com o tamanho do sistema, e ajustes em lei de potência que fornecem os expoentes de rugosidade $\alpha = 0.50(2)$ e dinâmico $z = 2.0(2)$, respectivamente.

3.3 Deposição Balística

O modelo de deposição balística ou de Vold [48] foi introduzido como um modelo de agregados coloidais, e posteriormente estudos concentraram-se nas propriedades de agregados porosos gerados por esse modelo [49]. A deposição balística é o modelo de crescimento no qual as partículas são depositadas de forma aleatória sobre o agregado, unindo-se ao primeiro vizinho encontrado. As regras desse modelo permitem que partículas se fixem lateralmente à interface, como ilustrado na figura 3.5. Nessa figura, podemos observar que a altura da partícula fixada será igual a maior entre a de seus primeiros vizinhos, ou a da sua própria posição acrescida de uma unidade. Dizemos então que os primeiros vizinhos estão correlacionados entre si, um vez que a posição final de uma nova partícula depende da posição ocupada pelas partículas já incorporadas à interface, e isso correlaciona o sistema e naturalmente leva à saturação da rugosidade.

Outra característica importante nesse modelo é a presença de lacunas como observado na figura 3.6, formadas por partículas suspensas (como as formadas pelas partículas "A e "D da figura 3.5(b)), que gera uma velocidade de crescimento maior do que a taxa de deposição.

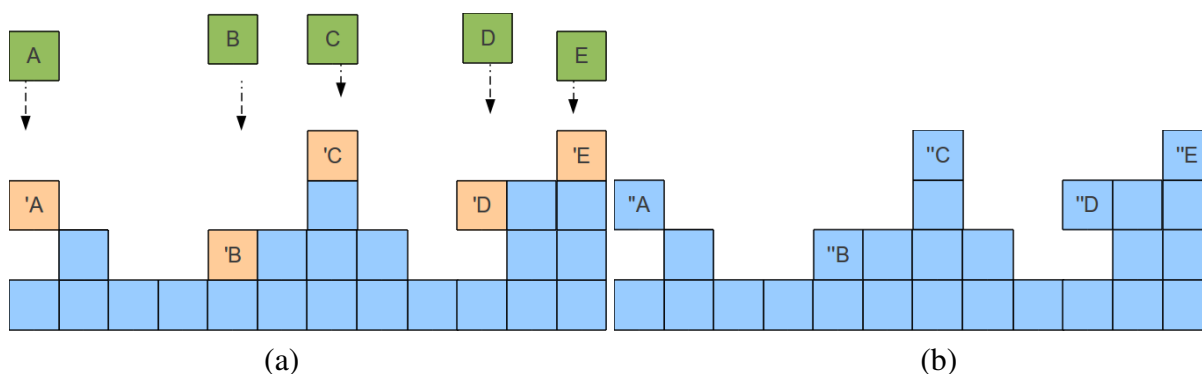


Figura 3.5: Esquema ilustrativo do modelo de deposição balística. (a) As partículas 'A, 'B, 'C, 'D e 'E são as partículas A, B, C, D e E após se agregarem. (b) "A, "B, "C, "D e "E são as partículas A, B, C, D e E já inseridas a interface.

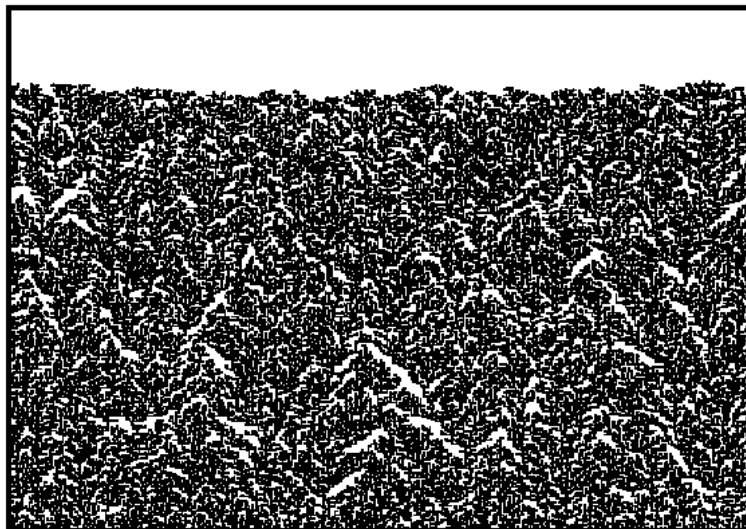


Figura 3.6: Perfil do modelo de deposição balística em rede de tamanho $L = 400$ após 200 passos de tempo, onde podemos observar as lacunas em seu volume.

Resultados de simulações numéricas em $d = 1 + 1$ para o modelo de deposição balística são apresentados na figura 3.7, caracterizando a evolução temporal da rugosidade para sistemas de diferentes tamanhos. Pode-se observar três regimes separados pelos tempos de crossover t_c e de saturação t_{sat} : para $t < t_c$ o sistema ainda está descorrelacionado e portanto o crescimento da rugosidade é caracterizado pelo expoente de crescimento $\beta = 1/2$, comportando-se inicialmente como o modelo de deposição aleatória discutido na secção 3.1; para $t_c < t < t_{sat}$, as correlações são suficientes para garantir um expoente de crescimento $\beta < 1/2$ e finalmente para $t > t_{sat}$ a rugosidade atinge a saturação.

Na inserção da figura 3.7(b) mostramos a dependência da rugosidade e do tempo de saturação em relação ao tamanho L do sistema. As retas mostram que W_{sat} e t_{sat} seguem lei de potência caracterizadas pelo expoente de rugosidade $\alpha = 0.44(1)$ e o expoente dinâmico $z = 1.58(2)$, respectivamente.

Com os valores de α e z , usando a equação 2.13, mostramos na figura principal 3.7(b) o colapso das curvas da figura 3.7(a) para os diferentes tamanhos L do sistema. Podemos observar que existe um transiente inicial para o qual as curvas se separam, devido as regiões iniciais das curvas caracterizadas pelo expoente de crescimento $\beta = 1/2$.

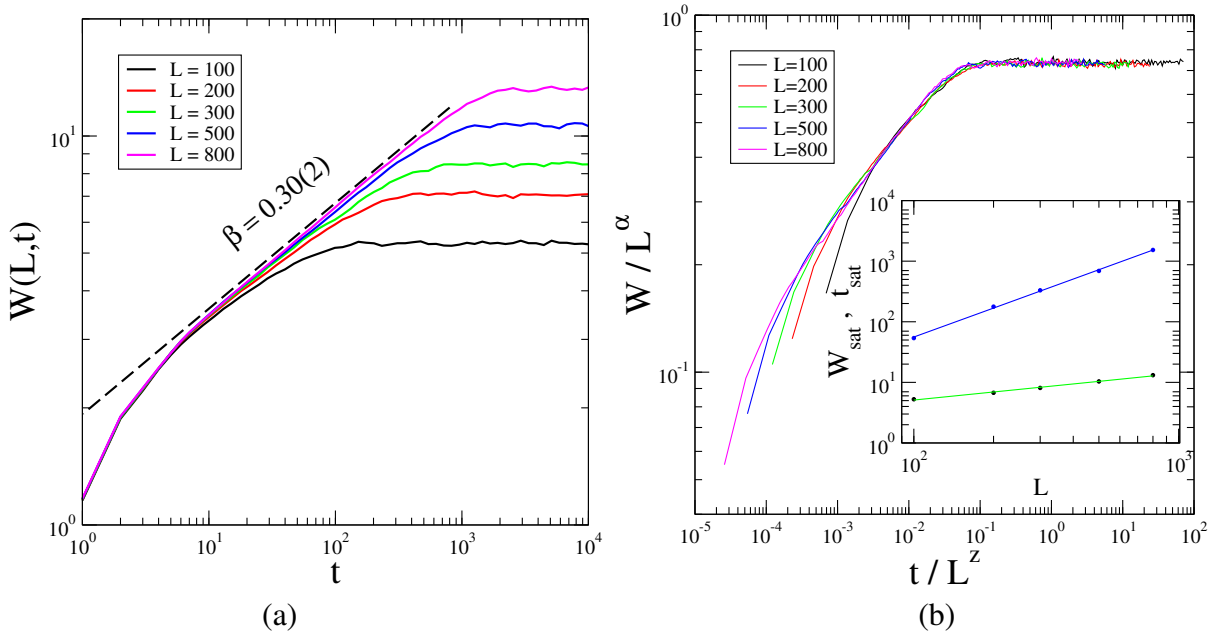


Figura 3.7: (a) Evolução da rugosidade em função do tempo para diferentes tamanhos do sistema, $L = 100; 200; 300; 500; 800$ em $d = 1 + 1$ dimensões com média sobre 300 amostras. (b) Colapso das curvas mostradas em (a) usando $\alpha = 0.44(1)$ e $z = 1.58(2)$. No destaque mostramos a dependência da rugosidade e do tempo de saturação com o tamanho do sistema, e ajustes em lei de potência que fornecem os expoentes de rugosidade $\alpha = 0.44(1)$ e dinâmico $z = 1.58(2)$, respectivamente.

Esse modelo, devido à formação de lacunas no interior da interface, possui uma lenta convergência nos expoentes, fazendo com que seja necessário o uso de simulações em larga escala para determinar classe de universalidade. Simulações mais recentes em $d = 1 + 1$ [50], apontam para os seguintes valores dos expoentes de escala $\beta \approx 0.33$ e $\alpha \approx 0.5$, enquanto trabalhos anteriores [19, 27] sugeriam valores um pouco menores de β e α . Esses valores estão próximos aos encontrados para a equação KPZ de modo que o modelo de deposição balística pertence à classe de universalidade KPZ.

3.4 Deposição com Recusa ou Modelo de Kim-Kosterlitz

No modelo conhecido como deposição aleatória com recusa (DAR) ou modelo KK, introduzido por Kim e Kosterlitz [51] em 1989, existe recusa de deposição de partículas quando a diferença de altura máxima entre primeiros vizinhos ultrapassa um determinado valor m . Tal

modelo simula a evaporação imediata de partículas que são depositadas num sítio correspondente a um máximo local. Uma partícula é depositada aleatoriamente num sítio i e quando a condição de restrição da diferença de altura $|\Delta h| \leq m$ entre o sítio escolhido e seus primeiros vizinhos for satisfeita, essa partícula é depositada na coluna do sítio sorteado, e caso contrário, ela é rejeitada, conforme ilustrado na figura 3.8.

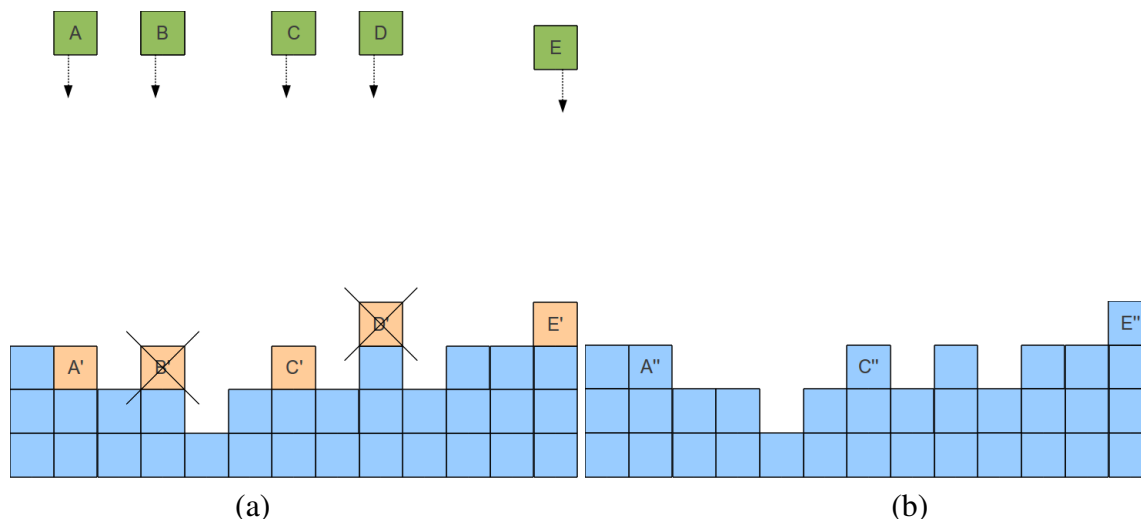


Figura 3.8: Esquema ilustrativo do modelo KK considerando $m = 1$. (a) A', B', C', D' e E' são as partículas A, B, C, D e E já depositadas. Note que B' e D' são recusadas. (b) A'', C'' e E'' são as partículas A, C, E já inseridas a interface.

Na figura 3.9(a) mostramos a evolução temporal da rugosidade para diferentes tamanhos de rede bem como uma lei de potência que determina o expoente de crescimento $\beta = 0.32(2)$ (linha tracejada). No detalhe da figura 3.9(b) mostramos a dependência da rugosidade e do tempo de saturação com o tamanho do sistema, e os ajustes em lei de potência cujas inclinações fornecem o expoente de rugosidade $\alpha = 0.50(2)$ e o expoente dinâmico $z = 1.49(3)$, respectivamente.

Com os valores de α e z , usando a equação 2.13 mostramos na figura principal 3.9(b) o colapso das curvas da figura 3.9(a) para os diferentes tamanhos L do sistema. Tais valores estão próximos aos encontrados por Kim e Kosterlitz [51] ($\alpha \approx 0.50$, $\beta \approx 1/3$ e $z \approx 3/2$) em $d = 1 + 1$ que sugerem que o modelo pertence à classe de universalidade KPZ discutida na seção 2.4, caracterizada pelos expoentes $\alpha = 0.50$, $\beta = 1/3$ e $z = 3/2$.

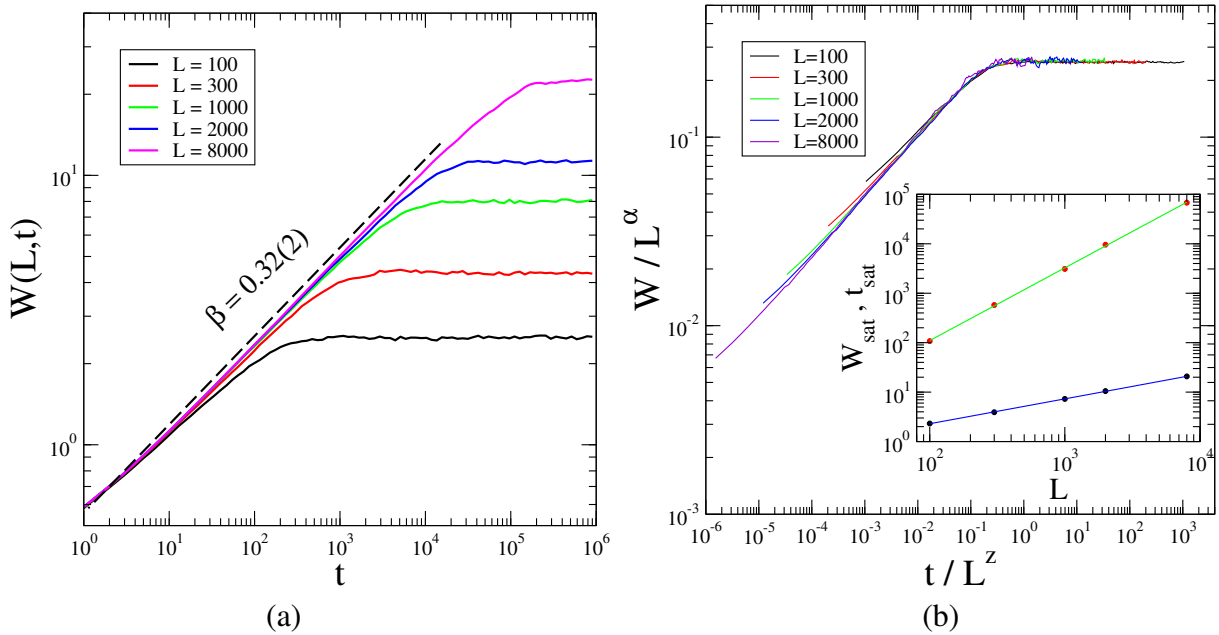


Figura 3.9: (a) Evolução da rugosidade em função do tempo para diferentes tamanhos do sistema, $L = 100; 300; 1000; 2000; 8000$ em $d = 1 + 1$ dimensões com média sobre 300 amostras. (b) Colapso das curvas mostradas em (a) usando $\alpha = 0.50(2)$ e $z = 1.49(3)$. No destaque mostramos a dependência da rugosidade e do tempo de saturação com o tamanho do sistema, e ajustes em lei de potência que fornecem os expoentes de rugosidade $\alpha = 0.50(2)$ e dinâmico $z = 1.49(3)$, respectivamente.

3.5 Modelo de Wolf-Villain

Em 1990, Wolf e Villain [23] propuseram um modelo com difusão superficial, com o objetivo de descrever processos de deposição de vapor, nos quais as forças de ligação na superfície são predominantes, desprezando a evaporação do material e a formação de lacunas no interior da interface, como ocorre no processo de crescimento por epitaxia por feixe molecular (MBE), em que uma partícula depositada move-se para um vizinho mais próximo se isso for energeticamente favorável.

Neste modelo, as partículas são depositadas aleatoriamente num sítio i e procuram dentre os sítios i e seus vizinhos, maximizar a energia de ligação, ou seja, as partículas difundem para o local onde o número de ligações é maior. Quando isso não é possível, ela permanece fixa ao sítio de deposição, conforme ilustrado na figura 3.10

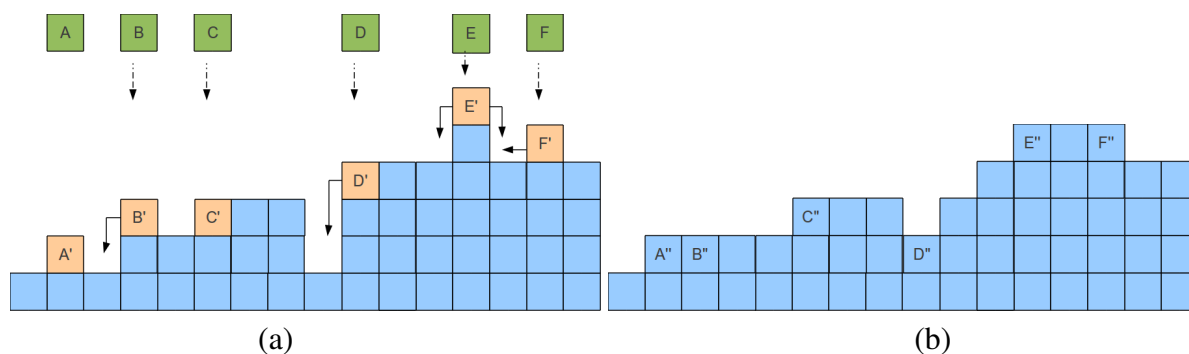


Figura 3.10: Esquema ilustrativo do modelo de deposição aleatória com difusão: Modelo de Wolf-Villain (WV). (a) A', B', C', D', E' e F' são as partículas A, B, C, D, E e F já depositadas. Note que B', D', E' e F' estão livres para difundir. E' possui igual chance de ir para esquerda ou direita. (b) A'', B'', C'', D'', E'' e F'' são as partículas A, B, C, D, E e F já fixadas a interface.

A evolução temporal da rugosidade e do comprimento característico para o modelo WV em $d = 1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões é mostrada na figura 3.11(a) e (b), respectivamente. Em 3.11(a) usamos uma rede de tamanho linear $L = 1024$. O expoente de crescimento encontrado em nossas simulações para tempos relativamente curtos foi $\beta = 0.37$ e o valor do expoente dinâmico $z = 4.1$, valores próximos àqueles obtidos para a equação de Mullins-Herring (MH) ($\beta = 3/8$ e $z = 4$). Diversos trabalhos [33, 52, 53, 54, 55, 56], usando diferentes técnicas, confirmam que no regime assintótico o modelo WV, $d = 1 + 1$ dimensões, evolui para a classe EW, para o qual $\beta = 1/4$.

Na figura 3.11(b) mostramos W e ξ para $d = 2 + 1$ em uma rede quadrada de tamanho linear $L = 128$. Para tempos relativamente curtos obtemos o expoente de crescimento $\beta = 0.21$ e o expoente dinâmico $z = 4$. Kotrla *et al.*[57] encontraram $\beta = 0.20$ e em um trabalho posterior Smilauer e Kotrla encontraram o expoente $\beta = 0.22$. A classe de universalidade do modelo WV em $d = 2 + 1$ dimensões não está bem definida. Alves e Moreira [58] encontraram uma transição para a classe de universalidade EW ($\beta = 0$). Das Sarmas *et al.*[53] usando técnicas de redução de ruído encontraram $\beta \approx 0.33$.

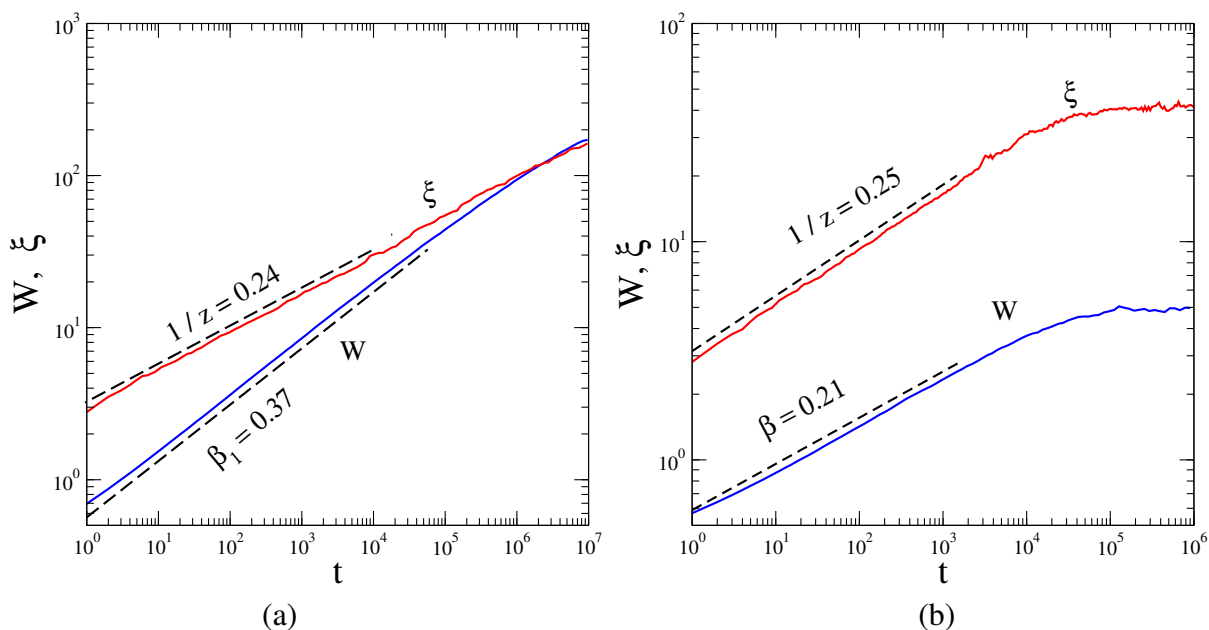


Figura 3.11: Evolução temporal da rugosidade e do comprimento característico para o modelo WV em (a) $d = 1 + 1$ e (b) $2 + 1$ dimensões na rede de tamanho linear $L = 1024$ e $L = 128$, respectivamente.

Na figura 3.12(a) e (b) mostramos a função de correlação em diferentes tempos do processo de crescimento para $d = 1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões, respectivamente. Os gráficos apresentam inicialmente um rápido decaimento e para $C(r) > \xi$ observamos que o comportamento não é oscilatório em torno de $C(r) = 0$, o que implica na ausência de superfícies auto-arranjadas que constituem a formação de morros. Isto pode ser observado nas figuras 3.13(a) e (b), em que geramos o perfil das superfícies em $d = 1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões. O que se observa são platôs e vales separados por grandes degraus.

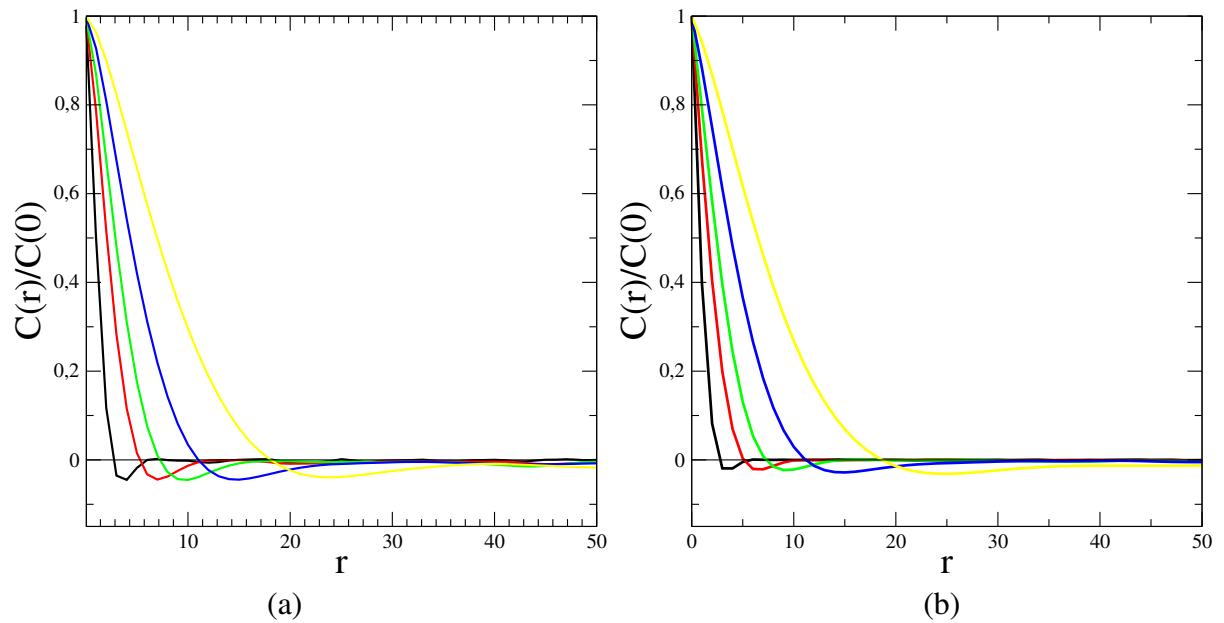
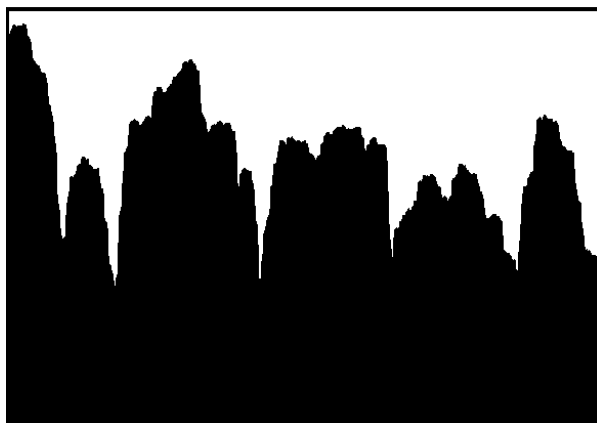
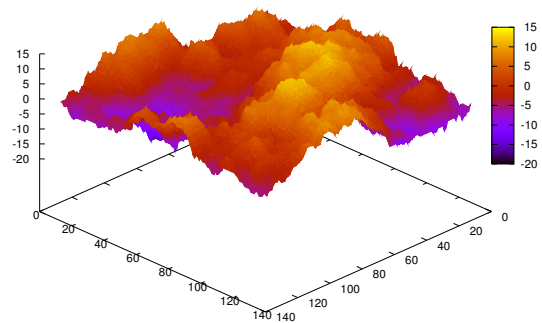


Figura 3.12: Função de correlação altura-altura para o modelo WV em (a) $d = 1 + 1$ e (b) $2 + 1$ dimensões na rede de tamanho linear $L = 1024$ e $L = 128$, respectivamente, com $t \approx 1, 10, 40, 200, 1.5 \times 10^3$.



(a)



(b)

Figura 3.13: Perfil do modelo WV em (a) $d = 1 + 1$ e (b) $2 + 1$ dimensões na rede de tamanho linear $L = 1024$ e 128 , após 10^5 passos de tempo, respectivamente.

3.6 Modelo de Das Sarma e Tamborenea

Das Sarma e Tamborenea (DT) [24], propuseram em 1991 um modelo similar ao de Wolf e Villain, no qual a partícula procura apenas aumentar o seu número de ligações.

Na figura 3.14 ilustramos os processos de deposição e de difusão. Uma partícula é depositada aleatoriamente num sítio i e procura dentre os sítios i e seus vizinhos, aumentar seu número de ligações com a interface, difundindo para o sítio vizinho com maior número de ligações. Mas isso ocorre somente se a partícula não possui nenhuma ligação lateral no sítio de deposição. Nos casos em que as partículas não possuem ligação lateral e não é possível aumentar esse número, ela permanece fixa ao sítio depositado.

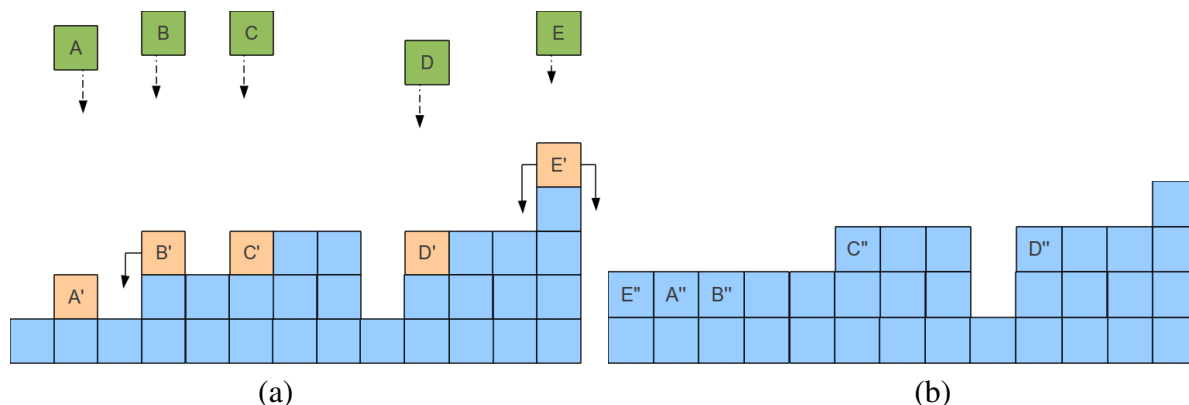


Figura 3.14: Esquema ilustrativo do modelo de deposição aleatória com difusão: Modelo de Das Sarma e Tamborenea (DT). (a) As partículas A', B', C', D' e E' são as partículas A, B, C, D e E já depositadas. Note que B' e E' estão livres para difundir. E' possui igual chance de ir para esquerda ou direita. (b) A'', B'', C'', D'' e E'' são as partículas A, B, C, D e E já fixadas a interface.

Na figura 3.15 mostramos a rugosidade e o comprimento característico para o modelo DT em (a) $d = 1 + 1$ e (b) $2 + 1$ dimensões, nas redes de tamanhos $L = 1024$ e $L = 128$, respectivamente. Assim como no modelo WV, em nossas simulações encontramos para tempos relativamente curtos o expoente $\beta = 0.37$ e $z = 4.1$ para modelo DT em $d = 1 + 1$ dimensões, conforme pode ser observado na figura 3.15(a). No regime assintótico, o modelo DT evolui para classe Villain-Lai-Das-Sarma (VLDS) [33, 34] ($\beta = 1/3$ e $z = 3$). Em $d = 2 + 1$ (figura 3.15 (b)) encontramos para o expoente de crescimento para tempos relativamente curtos $\beta = 0.26$ e $z = 4$, no entanto, a classe de universalidade, como no modelo WV, não é bem definida.

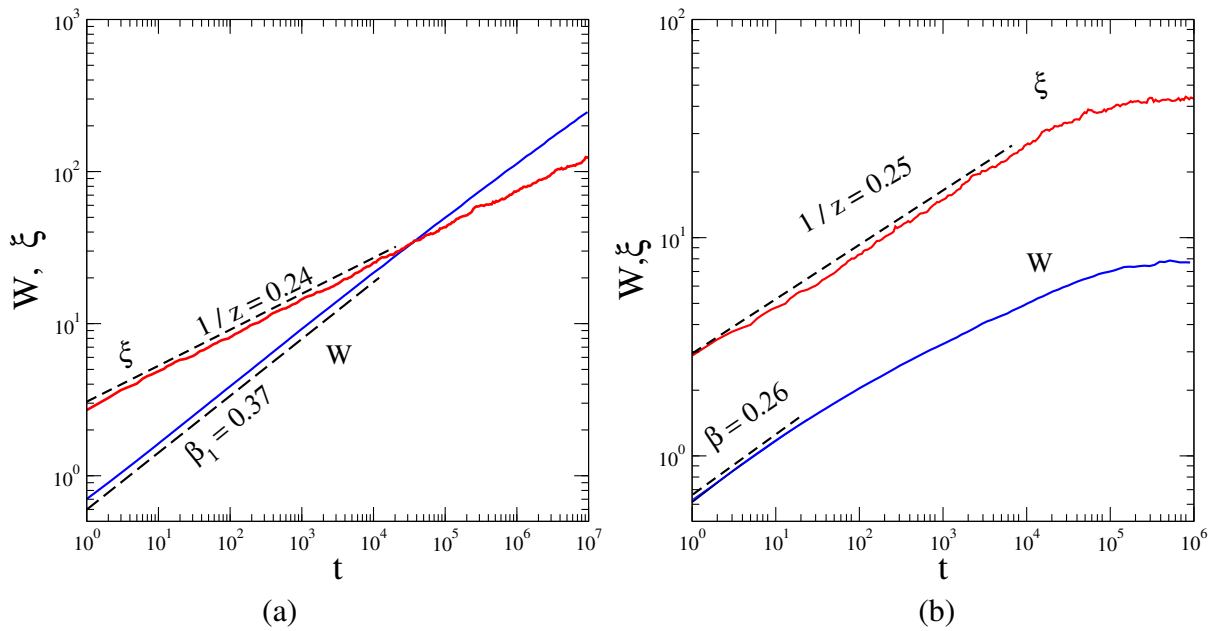


Figura 3.15: Evolução temporal da rugosidade e do comprimento característico para o modelo DT em (a) $d = 1 + 1$ e (b) $2 + 1$ dimensões na rede de tamanho linear $L = 1024$ e $L = 128$, respectivamente.

O modelo DT apresenta uma interface semelhante ao modelo WV, caracterizada pela ausência de estruturas de morros. A função de correlação altura-altura mostrada nas figuras 3.16(a) e (b) descreve este comportamento.

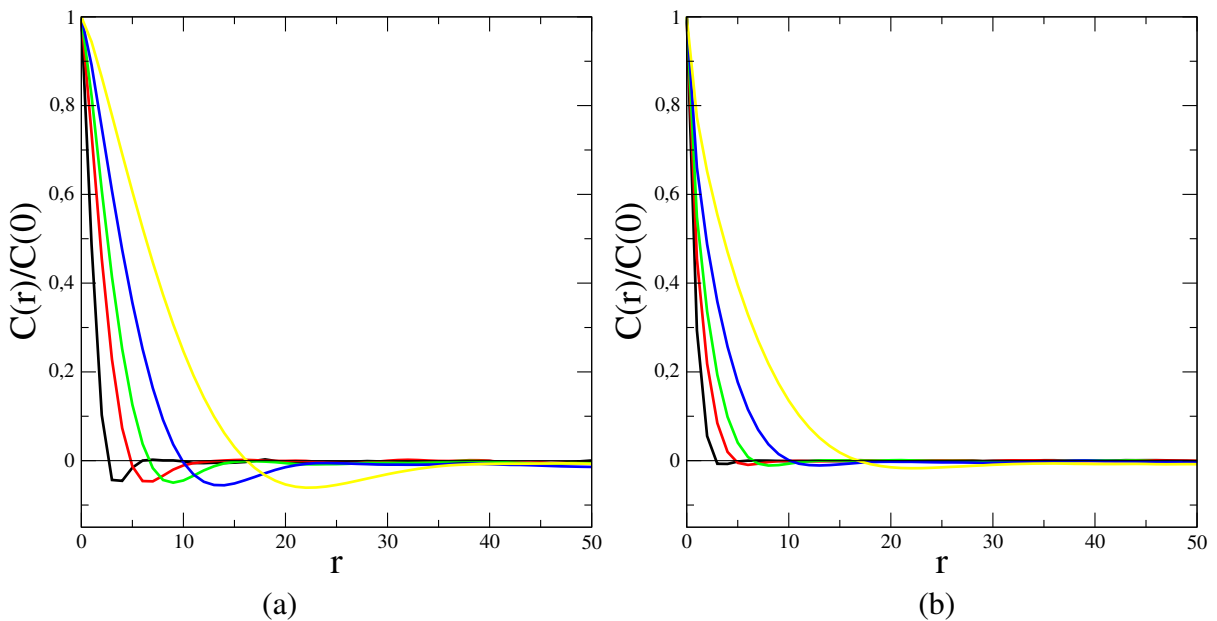
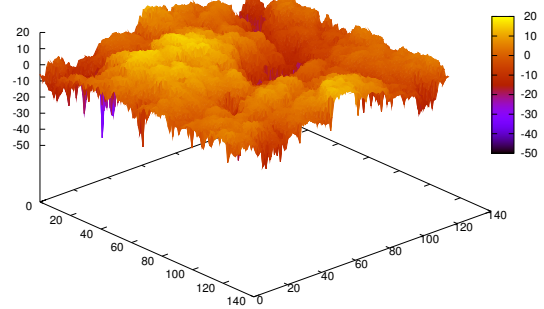


Figura 3.16: Função de correlação altura-altura para o modelo DT em (a) $d = 1 + 1$ e (b) $2 + 1$ dimensões na rede de tamanho linear $L = 1024$ e $L = 128$, respectivamente, com $t \approx 1, 10, 40, 200, 1.5 \times 10^3$.

Assim como no modelo WV, o que se observa são platôs e vales, separados por grandes degraus, como podemos observar nas figuras 3.17(a) e (b), em que geramos o perfil das interfaces após 10^5 passos de tempo.



(a)



(b)

Figura 3.17: Perfil do modelo DT em (a) $d = 1 + 1$ e (b) $2 + 1$ dimensões na rede de tamanho $L = 1024$ após 10^5 passos de tempo.

Capítulo 4

Efeito de uma Barreira Cinética em Modelos com Difusão Limitada

Os primeiros modelos discretos que buscavam descrever experimentos de crescimento de filmes finos por MBE foram introduzidos independentemente por Wolf e Villain (WV) [23] e Das Sarma e Tamborenea (DT) [24] no início da década de 1990. Tais modelos foram propostos para investigar o efeito da difusão superficial das partículas sobre o substrato. Os modelos WV e DT, além de descreverem experimentos de crescimento de filmes finos por MBE, tornaram-se a primeira evidência numérica indicando a existência de classes de universalidades diferentes das classes EW e KPZ.

Esses modelos diferem-se ligeiramente no que diz respeito ao processo de difusão. No modelo WV, uma partícula procura maximizar seu número de coordenação, procurando entre o sítio depositado e seus primeiros vizinhos aquele que possui o maior número de ligações. No modelo DT, uma partícula procura apenas aumentar o número de ligações quando o sítio depositado não possui ligação lateral. Devido as regras de crescimento dos modelos WV e DT, as partículas possuem mobilidade limitada a seus primeiros vizinhos e dessa forma correspondem a uma descrição limitada de processos de crescimento como MBE, nos quais as partículas podem difundir com maior ou menor facilidade, dependendo da temperatura do substrato. Um modelo mais realista, que possui maior semelhança aos processos típicos que ocorrem durante o crescimento MBE, é o modelo com ativação térmica. Neste modelo, todas as partículas da superfície podem difundir com uma probabilidade dada pela lei de Arrhenius $D = \nu_0 \exp(-E_D/k_B T)$, onde ν_0 é a frequência de tentativas de difusão, T a temperatura de crescimento e E_D a energia de ativação de difusão [40]. No entanto, apesar desse modelo ser mais realista do ponto de vista de crescimento MBE, ele demanda longo tempo computacional, limitando os tamanhos e tempos das simulações.

Uma característica típica observada na morfologia das interfaces geradas por técnicas de

crescimento epitaxial é a formação de morros, que surgem devido à barreiras cinéticas nas bordas de terraços. A barreira dificulta o movimento das partículas para fora dos terraços, induzindo tendências nas caminhadas das partículas.

A formação de morros tem atraído a atenção e diversos trabalhos [5, 6, 21, 59] foram propostos para simular as condições básicas para a ocorrência de tal morfologia na dinâmica de crescimento de interfaces.

Nesse capítulo estudamos os efeitos da introdução de uma barreira cinética que aparece quando incluímos a difusão normal ao substrato na migração entre planos diferentes nos modelos de Wolf-Villain e Das Sarma-Tamborenea. O objetivo é investigar as alterações morfológicas e a dinâmica de crescimento de interfaces devido a essa barreira em substratos unidimensionais e bidimensionais. Investigamos também mais de uma tentativa de difusão para as partículas, aumentando a mobilidade, e assim permitindo que as mesmas se fixem irreversivelmente em sítios mais afastados do sítio de deposição.

Na primeira seção descreveremos as modificações que serão implementadas às regras usuais dos modelos WV e DT e introduziremos uma relação para medir a corrente entre planos a diferentes alturas. Nas demais seções deste capítulo apresentaremos e discutiremos os resultados obtidos nas simulações em $d = 1 + 1$ e $d = 2 + 1$ para os modelos com barreira.

4.1 Implementação dos Modelos

Em nosso modelo uma barreira em degraus é implementada adicionando às regras usuais dos modelos WV e DT, vistos na seção 3.5 e 3.6, respectivamente, a probabilidade de movimento entre planos dependente da diferença de altura Δh entre eles. A determinação da probabilidade da partícula que se move para um sítio vizinho ou é refletida para sua posição inicial envolve a solução de uma caminhada aleatória unidimensional com bordas absorventes [60].

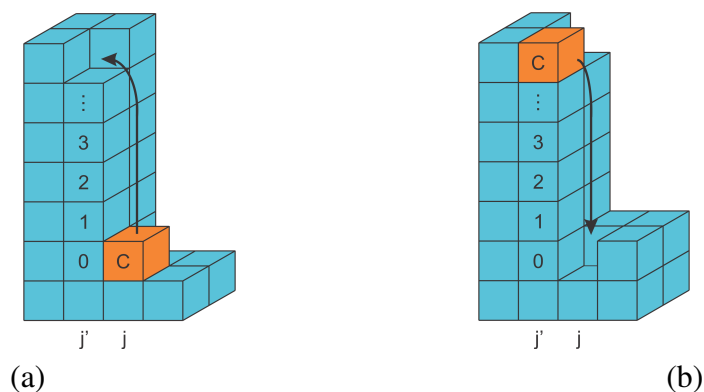


Figura 4.1: Ilustração de um degrau multicamadas (a) ascendente e (b) descendente, contendo $L + 1$ sítios. A partícula inicialmente em um sítio j tenta a difusão para um sítio j' para assumir a posição indicada pela seta.

A probabilidade resultante da difusão através do degrau, tanto para movimento ascendente quanto para movimento descendente é dada por

$$P_{\delta h}(i, i') = \begin{cases} 1, & \text{se } |\Delta h| < 2 \\ \frac{1}{|\Delta h|}, & \text{se } |\Delta h| \geq 2 \end{cases} \quad (4.1)$$

em que $\Delta h = h(i) - h(i')$ é a diferença de altura (tamanho do degrau), com i denotando o sítio onde a partícula está e i' o sítio para onde a partícula irá tentar se mover. A dedução dessa expressão é detalhada no apêndice A.

A probabilidade de difusão entre planos é eficientemente implementada com uma listagem sempre atualizada, com informações referentes a cada partícula, como sua posição na rede, sua altura no substrato e seu número de coordenação lateral. O processo de difusão se repete até que n_s tentativas de difusão sejam concluídos e uma nova partícula seja fixada irreversivelmente ao substrato [22], conforme ilustrado na figura 4.2. Com n_s passos de difusão uma partícula terá uma mobilidade ℓ , com ℓ sendo a distância entre o sítio no qual a partícula foi depositada e o sítio escolhido para fixar-se irreversivelmente.

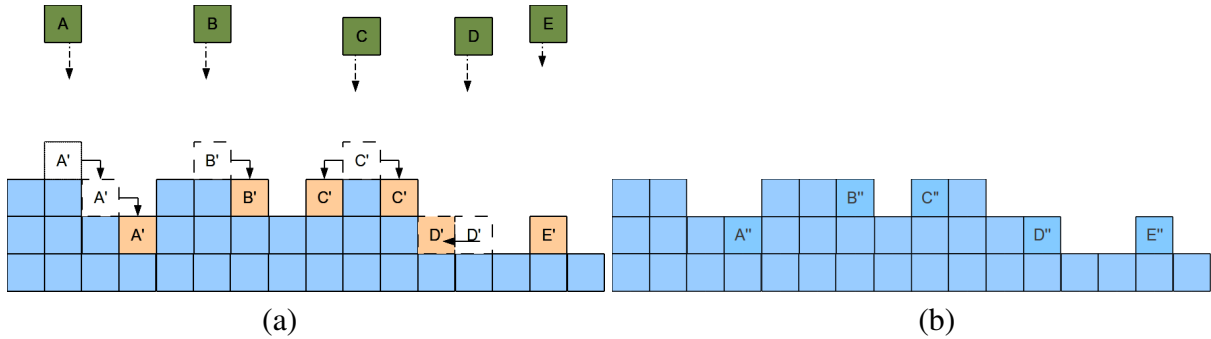


Figura 4.2: (a) Esquema ilustrativo do Modelo WV com barreira, com número de passos de difusão $n_s = 2$ em $d = 1 + 1$ dimensões. (a) As partículas A', B', C', D' e E' são as partículas A, B, C, D e E depositadas e difundindo-se na superfície. (b) A'', B'', C'', D'' e E'' são as partículas A, B, C, D e E já inseridas a interface.

Os modelos WV e DT são definidos em um substrato d -dimensional de tamanho linear L . A cada sítio i associamos uma variável $n_i(t)$ que representa o número de coordenações que uma partícula possuirá ao ser adicionada a esse sítio. A condição inicial é dada por $h_i(t) = 0$ e $n_i(t) = 0 \forall i$, isto é, a interface é lisa em $t = 0$. As regras de evolução para os modelos WV e DT são definidas conforme descrito a seguir e ilustrado na figura 4.2:

- i - Uma partícula é depositada ao acaso em um sítio i ;

- ii-* Verifica-se qual entre os $2d + 1$ sítios (o de deposição e seus $2d$ primeiros vizinhos) possui número máximo de coordenação no caso WV ou número maior no caso DT. Esse é escolhido como candidato a sítio de crescimento;
- iii-* A difusão da partícula para o sítio i' , candidato a sítio de crescimento, ocorre com probabilidade dada pela equação 4.1.
- iv-* Se a partícula difunde para i' e $n_{i'}$ não é máximo no caso WV ou não é maior e não possui ligação lateral ($n_{i'} = 0$) no caso DT ou o número de passos de difusão é menor que n_s , retornamos a *ii*.
- v-* Cessados os n_s passos de difusão ou encontrado um sítio com número máximo de coordenação no caso WV ou um número maior no caso DT, a partícula fixa-se irreversivelmente ao substrato, e acrescentamos uma unidade a altura do sítio escolhido.

Simulações em $d = 1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões foram realizadas para os modelos WV e DT modificados usando condições de contorno periódicas e condições de contorno helicoidais em redes quadrada e em triangular, respectivamente. No caso bidimensional, alocamos as redes em vetores unidimensionais de tamanho L^2 sendo a vizinhança do sítio i dada pelo conjunto de sítios definidos por $\{i - 1, i + 1, i - L, i + L\}$ para a rede quadrada e $\{i - 1, i + 1, i - L, i + L, i - L + 1, i + L - 1\}$ para rede triangular, como ilustrado na figura 4.3.

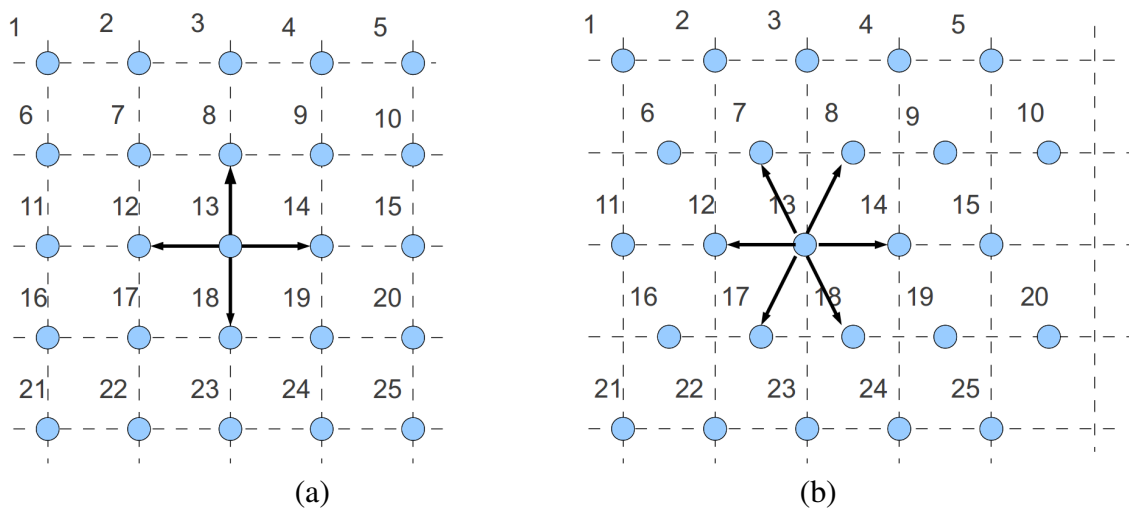


Figura 4.3: Representação de uma (a) rede quadrada com seus 4 primeiros vizinhos e (b) triangular com seus 6 primeiros vizinhos.

Em $d = 1 + 1$ dimensões, utilizamos redes com tamanho linear $L = 2^{12}$ e consideramos uma média sobre 100 amostras. Para $d = 2 + 1$ dimensões, usamos redes com tamanho linear $L = 2^7$ e usamos uma média com 50 amostras. Em todas as nossas simulações medimos a rugosidade, o comprimento de correlação altura-altura e a corrente entre planos (definida a seguir), variando o parâmetro n_s que determina o número de passos.

Afim de quantificarmos o fluxo de partículas através dos degraus, definimos a corrente na direção perpendicular ao substrato da seguinte forma [22]

$$J_z = \frac{1}{2L^d q} \sum_i \sum_{i'} \Theta(\delta h) D(i, i') P_{\delta h}(i, i') \quad (4.2)$$

que nos fornece a taxa de difusão média entre camadas por sítio, em que a soma em i é sobre todos os sítios enquanto a soma em i' é sobre todos os q primeiros vizinhos de i . O fator $1/2$ deve-se ao fato de cada ligação entre i e i' ser contada duas vezes. A função $\Theta(x)$ retorna o sinal de x , e é dada por,

$$\Theta(x) = \begin{cases} +1, & \text{se } x > 0 \\ 0, & \text{se } x = 0 \\ -1, & \text{se } x < 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

Note que esse $\Theta(x)$ qualifica a difusão entre planos a alturas diferentes, sendo que movimentos ascendentes contribuem positivamente, descendente contribuem negativamente e no mesmo plano não contribuem, pois $\Theta(0) = 0$.

A probabilidade $P_{\delta h}(i, i')$ é dada pela equação 4.1 e a grandeza $D(i, i')$ depende da regra do modelo. No modelo WV, ela é dada por

$$D(i, i') = \begin{cases} 1, & \text{se } n_{i'} \in \{n_{max}\} \text{ e } n_i \notin \{n_{max}\} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.4)$$

em que $\{n_{max}\}$ representa o conjunto de sítios com número máximo de coordenação lateral entre o sítio i e sua vizinhança. Já para o modelo DT, $D(i, i')$ é dado por

$$D(i, i') = \begin{cases} 1, & \text{se } n_{i'} \in \{n_{maior}\} \text{ e } n_i = 0 \text{ e } n_i \notin \{n_{maior}\} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.5)$$

em que $\{n_{maior}\}$ representa o conjunto de sítios com número de coordenação lateral maior que zero.

4.2 Modelo WV

4.2.1 Simulações $d = 1 + 1$

Nas figuras 4.4 (a) e (b) mostramos a evolução de regiões da interface que possuem 500 sítios de uma rede de tamanho linear $L = 2^{12}$ com $n_s = 1$ e $n_s = 10$, respectivamente, para o modelo WV com barreira cinética e nas figuras 4.4 (c) e (d) mostramos para o modelo WV original sem barreira cinética. Note que as barreiras cinéticas dependentes da diferença de alturas produzem estruturas de morros auto-arranjados, com morfologia quase periódicas, como podemos observar de forma mais evidente na figura 4.4 (b). O mesmo não é observado para o modelo WV sem barreira cinética. Podemos notar que a estrutura em morros auto-arranjados não é evidente nos instantes iniciais do processo de crescimento do modelo com barreira cinética, como observado nos detalhes das figuras 4.4 (a) e (b).

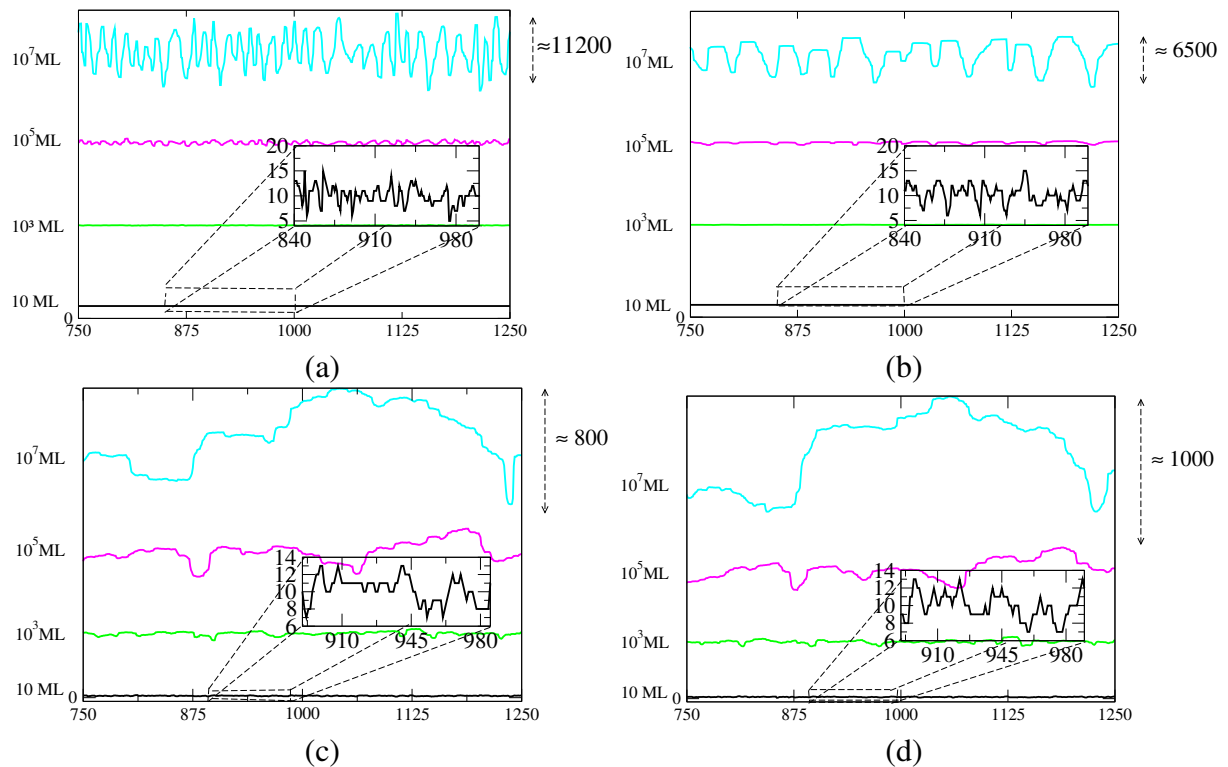


Figura 4.4: Evolução da interface ((a), $n_s = 1$ e (b), $n_s = 10$) com barreira cinética e ((c), $n_s = 1$ e (d), $n_s = 10$) sem barreira cinética em $d = 1 + 1$ dimensões, para o modelo WV.

Como discutido na seção 2.7, uma quantidade básica para caracterizar a morfologia de superfícies com a presença de morros é a função de correlação altura-altura $C(r)$ definida pela

equação 2.36. As oscilações em torno de zero para $C(r) > \xi$, são assinaturas de superfícies que apresentam formação de morros com morfologia auto-arranjada como pode ser observado nos gráficos da figura 4.5 (o que não foi observado para o modelo WV sem barreira cinética (figura 3.12(a), pág 28)). As curvas foram normalizadas usando $C(r)/C(0)$ para uma melhor visualização. Na figura 4.5 mostramos o gráfico usando $n_s = 1$ (em (a)) e 10 (em (b)). Note que o aumento de tentativas de difusão leva a um aumento no comprimento característico ξ e a um aumento na distância média entre os morros. Se considerarmos um tempo de crescimento específico, como por exemplo $t = 10^7$ ML, nos gráficos 4.4(a) e (b), podemos notar que um aumento no número de passos de difusão gera interfaces com distância média \bar{d} entre morros maiores.

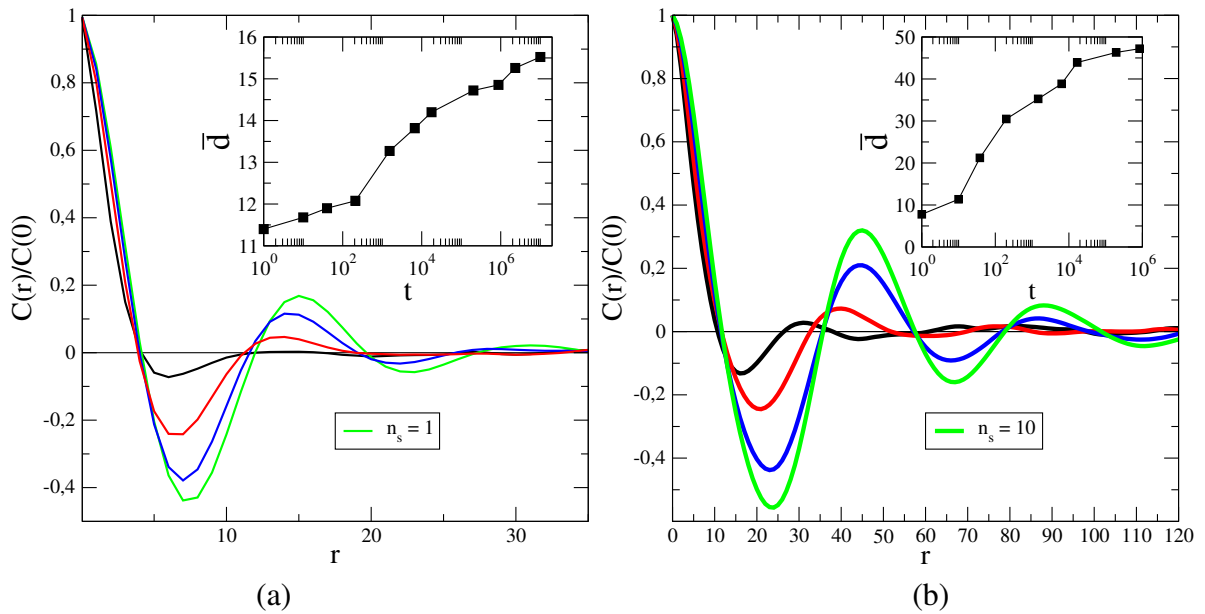


Figura 4.5: Função de correlação altura-altura para o modelo WV com barreira em substratos unidimensionais de tamanho $L = 2^{12}$, usando (a) $n_s = 1$, (b) $n_s = 10$ e $t \approx 40, 1.5 \times 10^3, 1.7 \times 10^4, 8.7 \times 10^5$.

No gráfico da figura 4.6(a) mostramos a evolução temporal da rugosidade e do comprimento característico ξ com $n_s = 1, 2$ e 10. Notamos claramente uma diminuição da rugosidade e um aumento no comprimento de correlação característico à medida que n_s cresce. Esse aumento no comprimento de correlação se deve ao aumento da distância de influência entre sítios vizinhos. No regime assintótico encontramos que o expoente de crescimento β independente de n_s vai invariavelmente para um valor muito próximo a 0.5. Trabalhos [26, 59, 61, 62] tem demonstrado que as grandes flutuações nas interfaces, referentes às paredes dos morros, são as responsáveis pela mudança no expoente de crescimento, ou seja, as alturas dos morros são descorrelacionadas, o que justifica o aparecimento do expoente $\beta \approx 0.5$

A corrente entre planos definida anteriormente é apresentada na figura 4.6(b). Pode-se observar uma significativa redução (em módulo) da taxa líquida do fluxo de partículas através dos degraus até $t \approx 10^5 ML$. A partir desse ponto, a taxa continua diminuindo de forma muito lenta a zero, onde teríamos um fluxo líquido nulo. O mesmo comportamento é observado para os diferentes valores de n_s . Porém, à medida que aumentamos o número de passos de difusão, o fluxo líquido das partículas através dos degraus aumenta (em módulo), exceto para os instantes iniciais do crescimento nos quais o valor da corrente independe de n_s . Este aumento (em módulo) do fluxo descendente tem como consequência a diminuição na largura das interfaces, o que está de acordo com os resultados observados nas figuras 4.4 (a) e (b).

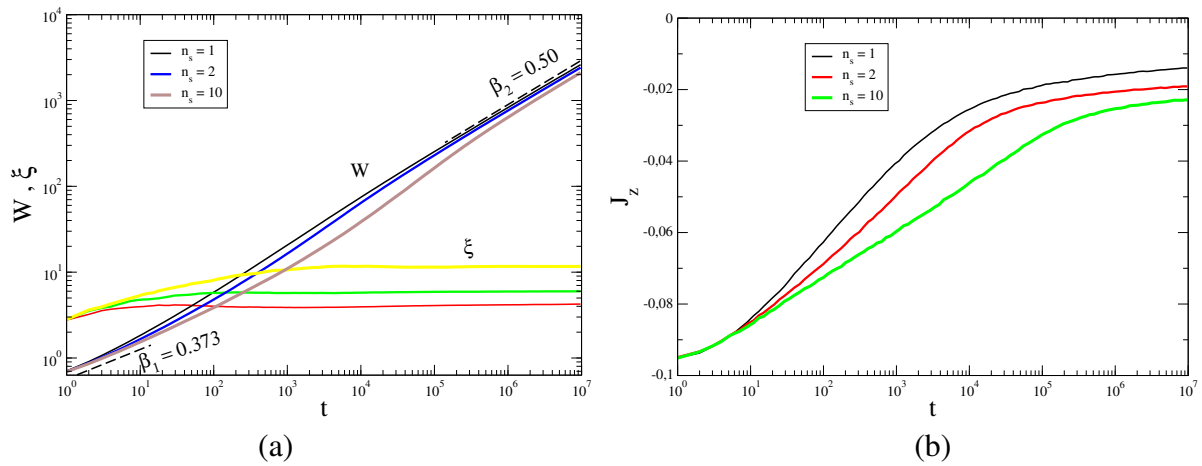


Figura 4.6: (a) Evolução temporal da rugosidade e do comprimento característico para o modelo WV com barreira em substratos unidimensionais na rede de tamanho $L = 2^{12}$. (b) Fluxo de partículas perpendicular ao plano do substrato da superfície para o modelo WV com barreira em $d = 1 + 1$ dimensões.

4.2.2 Simulações $d = 2 + 1$

A morfologia das interfaces para o modelo WV com barreira cinética em $d = 2 + 1$ na rede quadrada é mostrada na figura 4.7 e na rede triangular na figura 4.8. As interfaces foram obtidas após a deposição de $10^3 ML$, $10^4 ML$ e $10^6 ML$ em redes de tamanho linear $L = 128$. O perfil de alturas foi tomado em relação a altura média e usamos $n_s = 1$ e $n_s = 10$.

Nas figuras 4.7 e 4.8, é possível observar que o aumento no número de passos n_s tem como resultado a suavização da interface, com formação de morros menos acentuados e em menor número, conseqüentemente com diminuição na rugosidade, e além disso, os morros ficam mais largos e mais evidentes. Isto ocorre porque o aumento do número de passos n_s aumentam as chances de que partículas vençam a barreira cinética implementada ao modelo WV e como veremos ainda nesta seção, esse modelo gera um fluxo líquido de partículas descendentes que difundem para terraços inferiores.

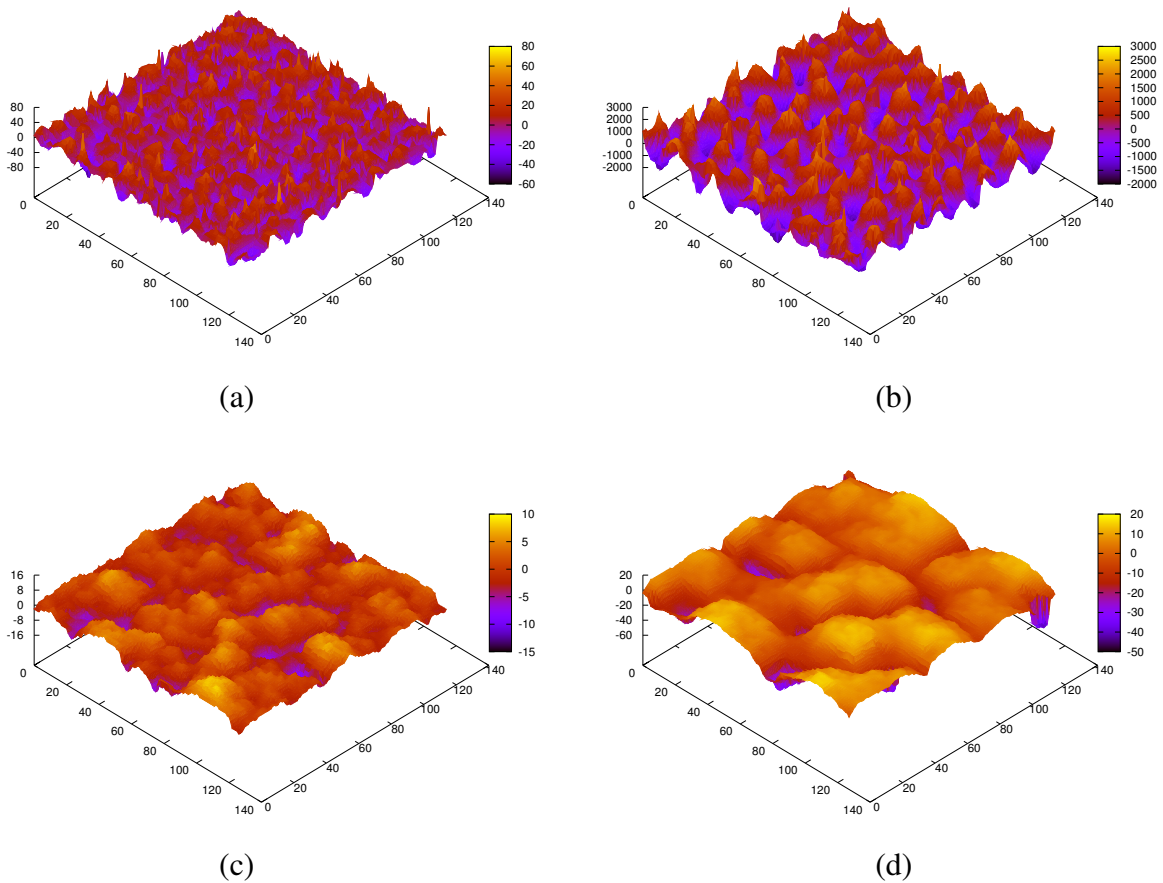


Figura 4.7: Morfologia das superfícies geradas pelo modelo WV com barreira em $d = 2 + 1$ dimensões na rede quadrada. Morfologia gerada após a deposição de $10^3 ML$ em (a) e $10^6 ML$ em (b) considerando $n_s = 1$. Morfologia gerada após a deposição de $10^3 ML$ em (c) e $10^4 ML$ em (d) com $n_s = 10$.

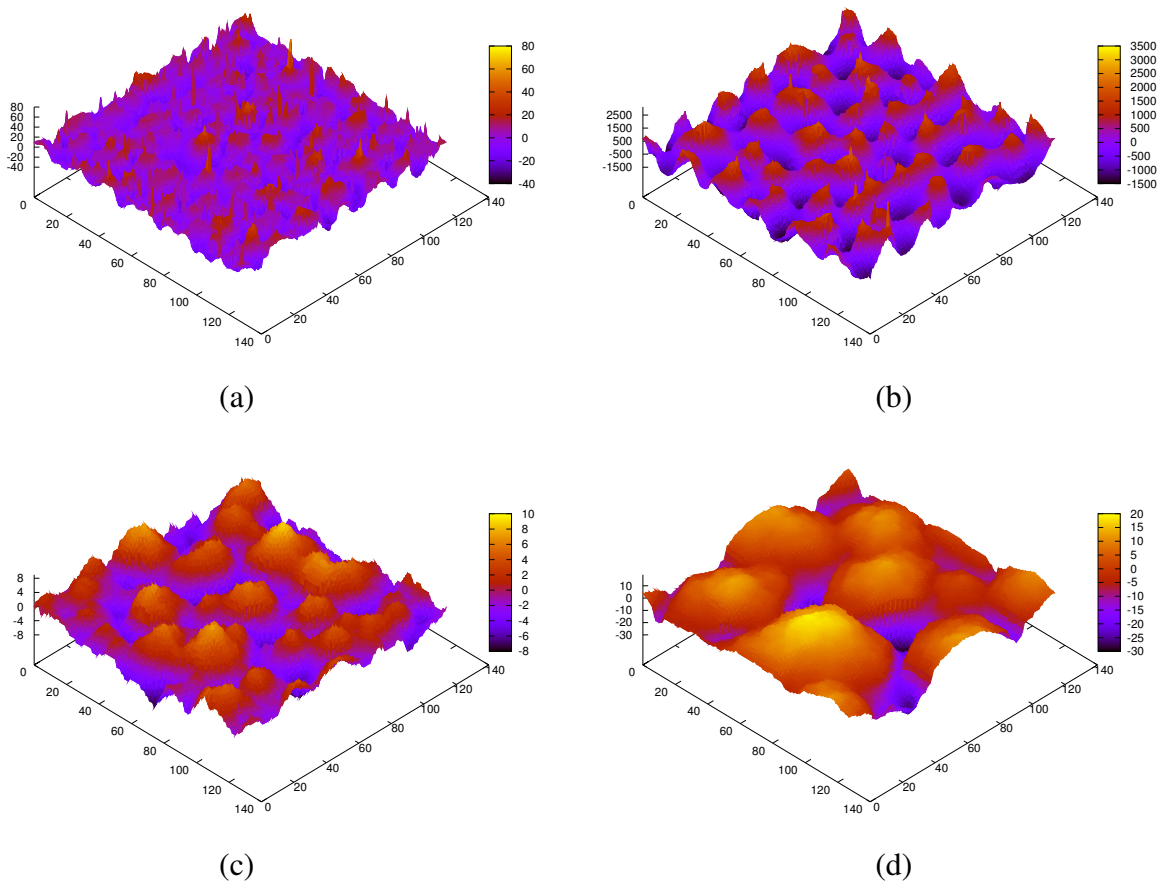


Figura 4.8: Morfologia das superfícies geradas pelo modelo WV com barreira em $d = 2 + 1$ dimensões na rede triangular. Morfologia gerada após a deposição de $10^3 ML$ em (a) e $10^6 ML$ em (b) considerando $n_s = 1$. Morfologia gerada após a deposição de $10^3 ML$ em (c) e $10^4 ML$ em (d) com $n_s = 10$.

A função de correlação para o modelo WV com barreira cinética em $d = 2 + 1$ (rede quadrada e triangular) é mostrada na figura 4.9. Em 4.9(a) e (c) apresentamos a função de correlação altura-altura nas diferentes redes, obtida usando $n_s = 1$ em tempos distintos do processo de crescimento do substrato. Novamente, as oscilações da função correlação altura-altura em torno de zero corresponde ao aspecto de formação de morros regulares e a distância média \bar{d} entre os morros cresce monotonicamente com o tempo, o que pode ser observado pelos gráficos no interior da figura 4.9. Esse aumento na distância média \bar{d} entre os morros também foi observado nas figuras 4.4 e 4.5, no caso unidimensional.

Nas figuras 4.9(b) e (d) mostramos a função de correlação altura-altura para o modelo WV com barreira cinética com $n_s = 10$. Pode-se notar o aumento da distância média entre os morros no tempo. Além disso, para n_s maior, o comprimento característico ξ para os diferentes tempos do processo de crescimento do substrato também fica maior, como pode ser observado comparando as figuras 4.9(a) e (b) (rede quadrada) ou 4.9(c) e (d) (rede triangular).

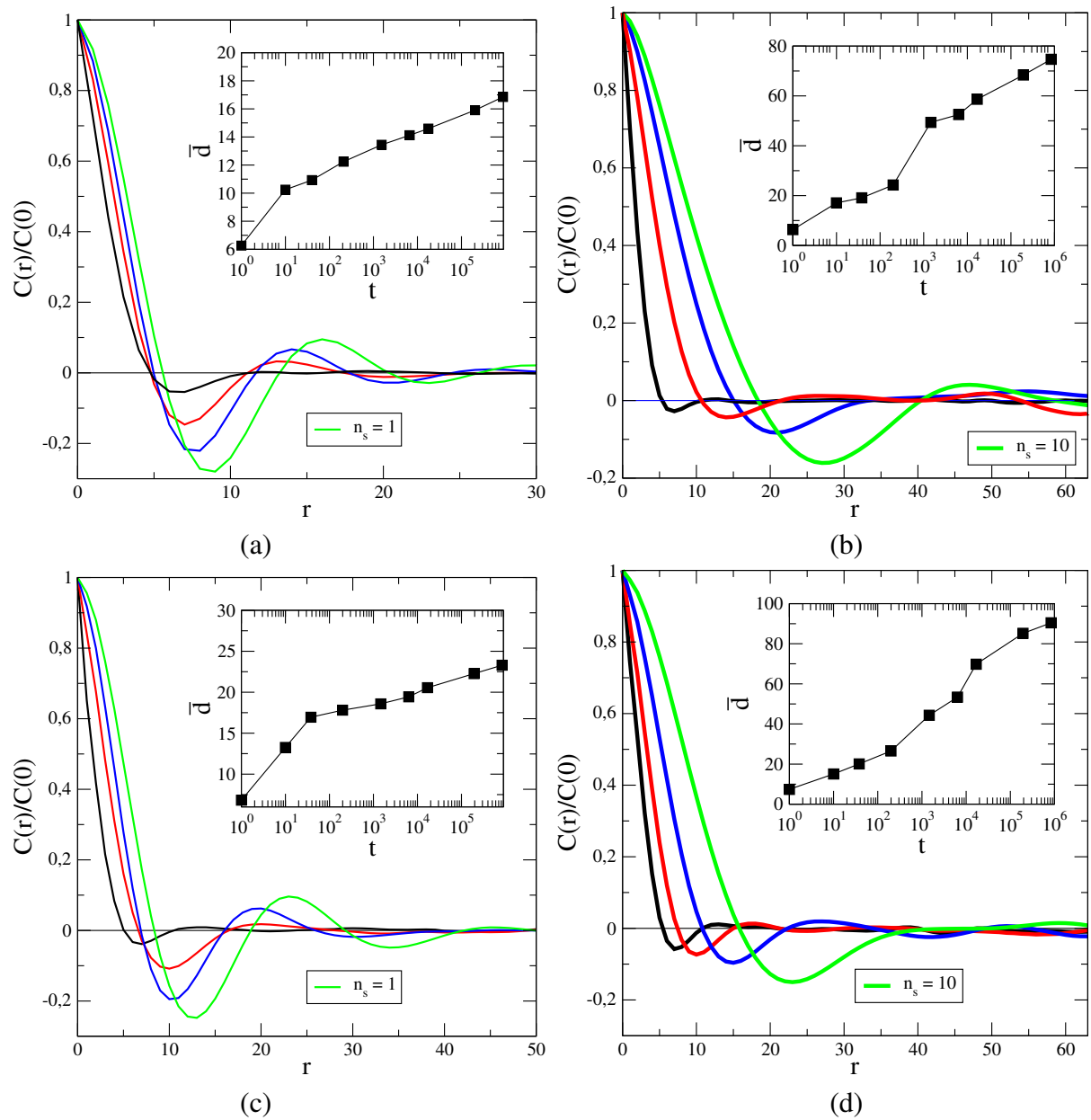


Figura 4.9: Função de correlação altura-altura para o modelo WV com barreira em substratos bi-dimensionais em rede quadrada e triangular. Função de correlação altura-altura com $n_s = 1$ em (a) e $n_s = 10$ em (b) para rede quadrada; e $n_s = 1$ em (c) e $n_s = 10$ em (d) para rede triangular e $t \approx 40, 1.5 \times 10^3, 1.7 \times 10^4, 8.7 \times 10^5$.

A evolução da rugosidade, assim como do comprimento característico ξ para o modelo WV com barreira cinética em $d = 2 + 1$ na rede quadrada e triangular são mostrados na figura 4.10. Podemos observar a diminuição da rugosidade e o aumento do comprimento característico quando aumentamos n_s , conforme discutido anteriormente nessa seção. Assim como em $d = 1 + 1$, em $d = 2 + 1$ a evolução temporal da rugosidade depois de um transiente inicial que depende do número de tentativas de difusão apresenta um expoente de crescimento que vai para um valor assintótico $\beta \approx 0.5$, que independe do tipo de rede e do número de tentativas de difusão.

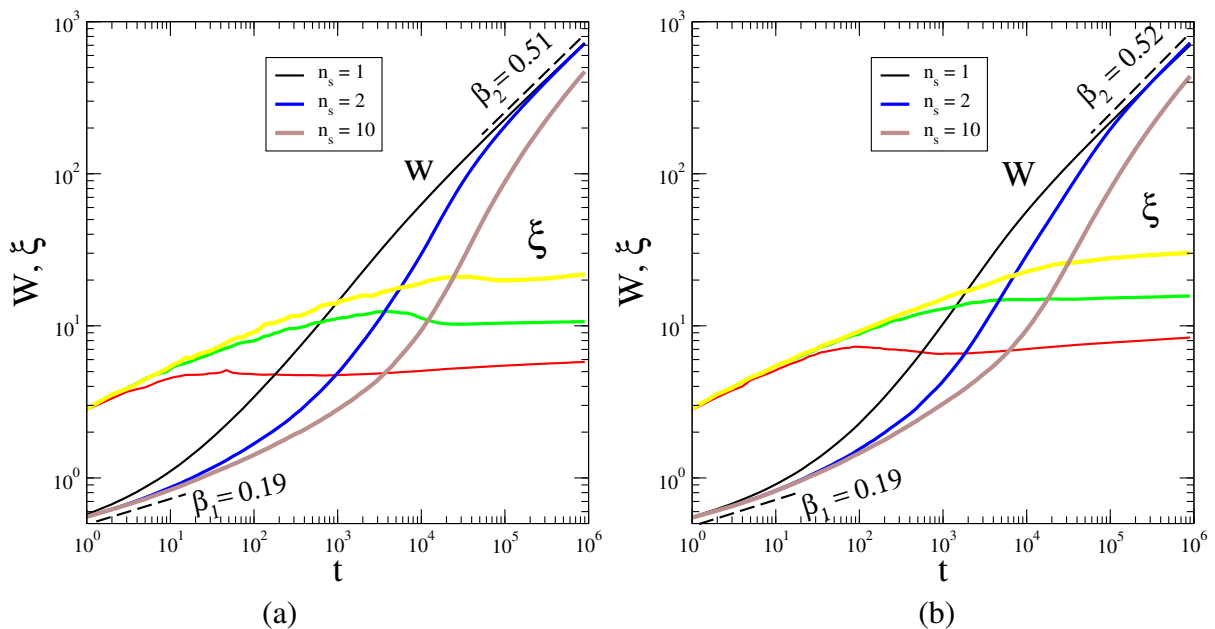


Figura 4.10: Evolução temporal da rugosidade e do comprimento característico para o modelo WV com barreira em substratos bidimensionais em rede (a) quadrada e (b) triangular, com tamanho $L = 128$.

Na figura 4.11 mostramos o gráfico do fluxo líquido de partículas através dos degraus, com os diferentes valores de n_s . Assim como no caso unidimensional, em $d = 2 + 1$ com (a) rede quadrada ou (b) triangular, observamos que esse fluxo é descendente (negativo) e com significativa redução (em modulo) até $t \approx 10^5$. A partir desse ponto observa-se uma lenta convergência para fluxo nulo.

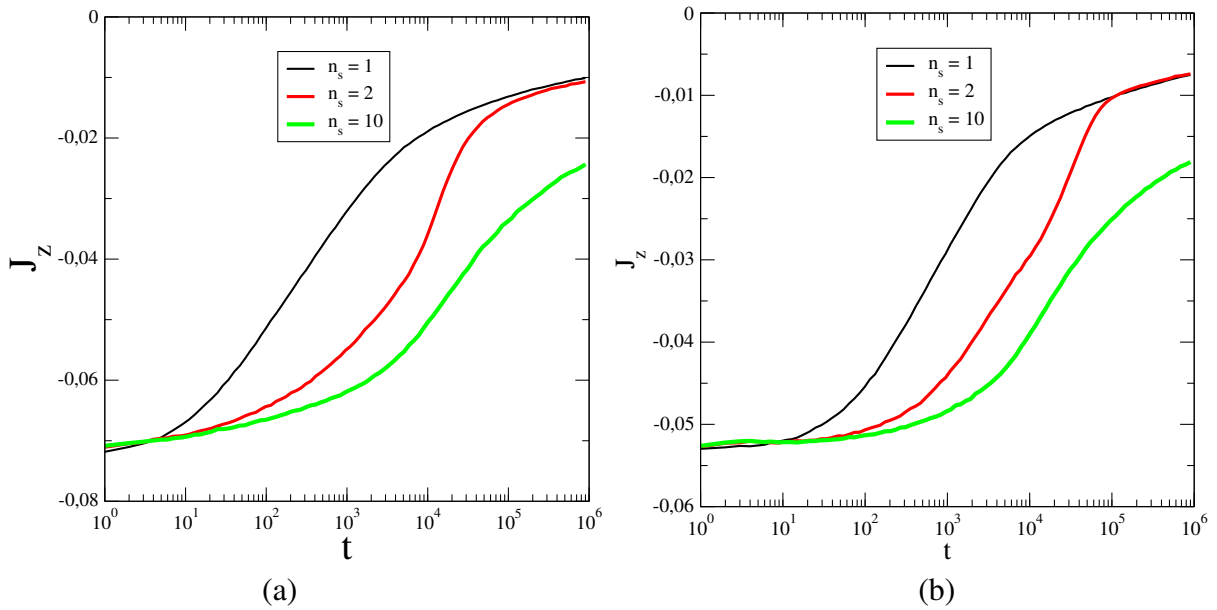


Figura 4.11: Fluxo de partículas perpendicular ao plano do substrato para o modelo WV com barreira em $d = 2 + 1$ dimensões em rede quadrada (a) e triangular (b).

4.3 Modelo DT

4.3.1 Simulações $d = 1 + 1$

O modelo DT com barreira cinética em $d = 1 + 1$ dimensões apresenta uma morfologia de interface com formação de morros, com aspectos semelhantes ao modelo WV. Na figura 4.12 (a) mostramos o perfil da morfologia das interfaces, obtidas durante o crescimento do substrato em diferentes tempos do processo de crescimento, representando uma seção de 500 sítios de um substrato de tamanho $L = 2^{12}$ sem barreira cinética e podemos observar que não há formação de morros auto-arranjados. Em 4.12(b) mostramos com barreira cinética e podemos notar a diferença no perfil das interfaces. A barreira cinética contribui para formação de estruturas de morros auto-arranjadas. Assim como no modelo WV, podemos notar que a formação de morros auto-arranjados não é tão evidente nos instantes iniciais do processo de crescimento do substrato, com pode ser observado em destaque nas figuras.

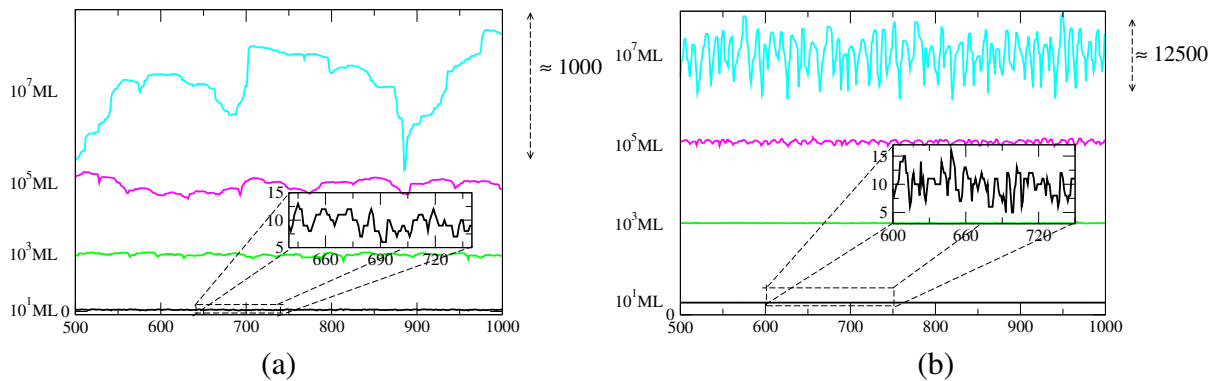


Figura 4.12: Evolução da interface (a) sem barreira cinética e (b) com barreira cinética em $d = 1 + 1$ dimensões, usando $n_s = 1$, para o modelo DT.

A função de correlação altura-altura para o modelo DT com barreira cinética em $d = 1 + 1$ dimensões é representada na figura 4.13, onde em 4.13(a) mostramos $n_s = 1$ e em 4.13(b) $n_s = 10$. Como discutido, as oscilações na função $C(r)$ evidenciam a morfologia de morros. Com o tempo de crescimento, a dinâmica da morfologia das interfaces vai mudando, com o aumento na distância média entre os morros, como pode ser visto nos gráficos internos às figuras 4.13(a) e (b). Assim como observado para o modelo WV, o aumento no número de passos de difusão n_s leva a um aumento nas distâncias médias entre os de morros.

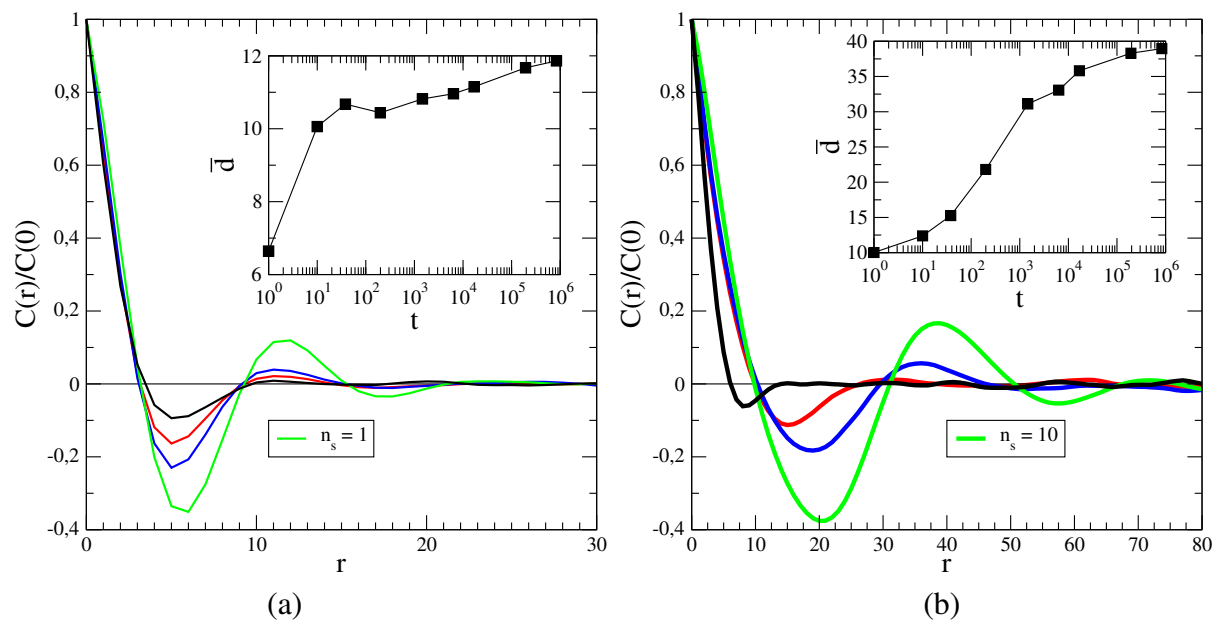


Figura 4.13: Função de correlação altura-altura para o modelo DT com barreira em substratos unidimensionais de tamanho $L = 2^{12}$. (a) Função de correlação altura-altura com $n_s = 1$ tentativa de difusão. (b) Função de correlação altura-altura com $n_s = 10$ tentativas de difusão.

A evolução da rugosidade e do comprimento de correlação para o modelo DT com barreira cinética em $d = 1 + 1$ dimensões possui um comportamento semelhante ao observado no modelo WV. No gráfico da figura 4.14(a) podemos notar que no regime assintótico, o expoente de crescimento encontrado é $\beta = 0.5$, o mesmo valor obtido para o modelo WV.

A corrente entre planos é mostrada no gráfico da figura 4.14(b). Podemos notar um fluxo líquido descendente nos degraus (corrente negativa) com características semelhantes ao modelo WV em $d = 1 + 1$, discutido na seção (4.2.1).

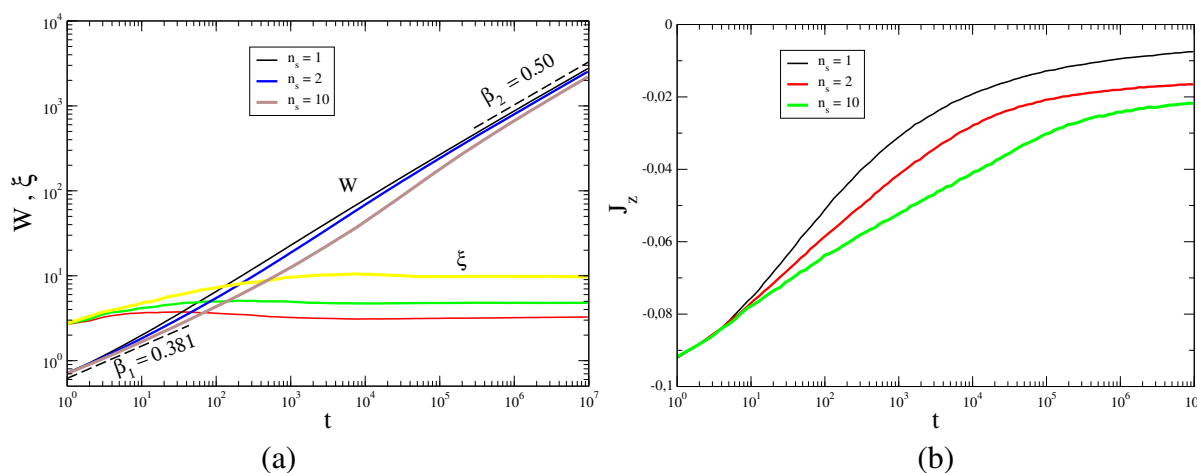


Figura 4.14: (a) Evolução temporal da rugosidade e do comprimento característico obtidos para o modelo DT com barreira em substratos unidimensionais na rede de tamanho $L = 2^{12}$. (b) Fluxo de partículas perpendicular ao plano do substrato da superfície para o modelo DT com barreira em $d = 1 + 1$ dimensões.

4.3.2 Simulações $d = 2 + 1$

A morfologia das interfaces para o modelo DT com barreira cinética em $d = 2 + 1$ para rede quadrada e triangular é mostrada nas figuras 4.15 e 4.16, respectivamente. As interfaces foram obtidas após a deposição de $10^3 ML$ e $10^6 ML$ em redes de tamanho linear $L = 128$. O perfil de alturas foi tomado em relação a altura média e , novamente usamos $n_s = 1$ e $n_s = 10$.

Assim como no modelo WV, comparando as figuras 4.15(b) e (d) ou 4.16(b) e (d), podemos observar que o aumento nas tentativas de difusão tem como resultado a suavização da interface, no entanto, não observamos formação de morros auto-arranjados.

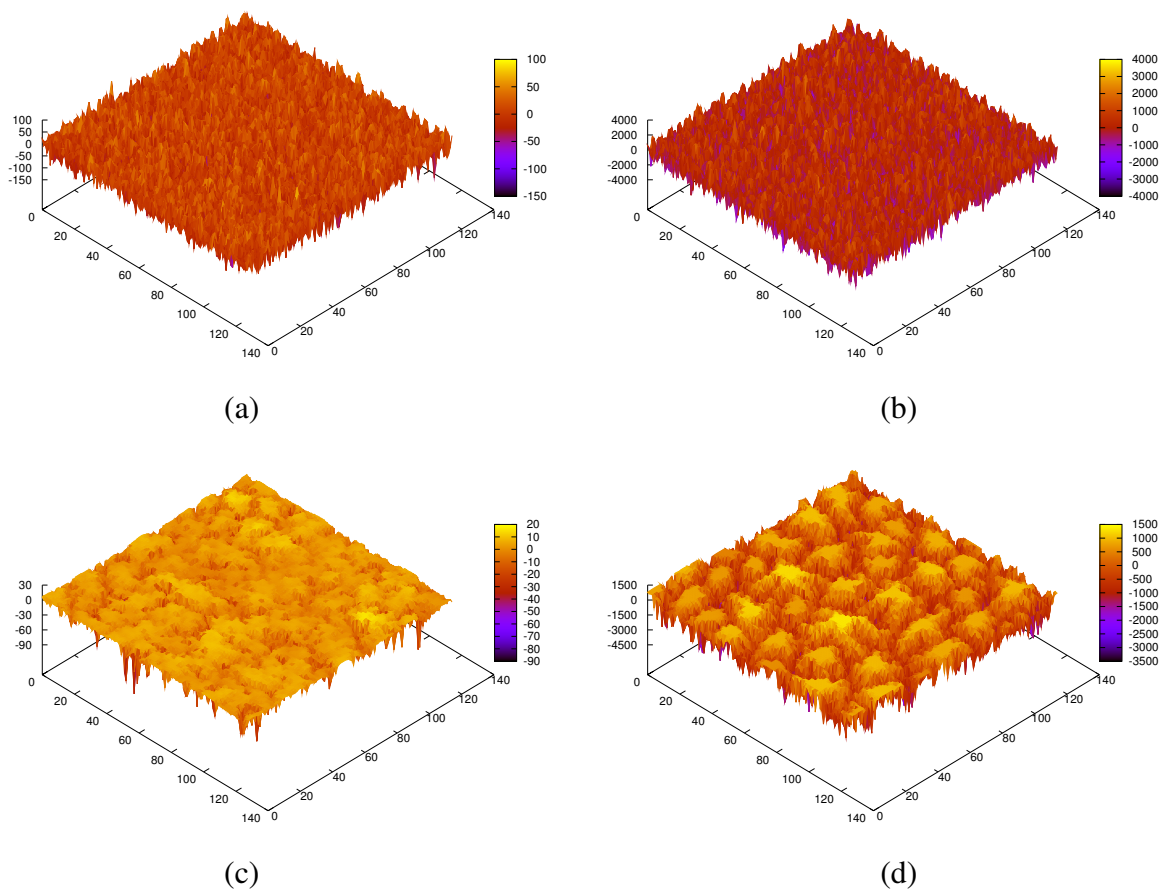


Figura 4.15: Morfologia das superfícies geradas pelo modelo DT com barreira em $d = 2+1$ dimensões na rede quadrada. Morfologia gerada após a deposição de $10^3 ML$ em (a) e $10^6 ML$ em (b) considerando $n_s = 1$. Morfologia gerada após a deposição de $10^3 ML$ em (c) e $10^6 ML$ em (d) com $n_s = 10$.

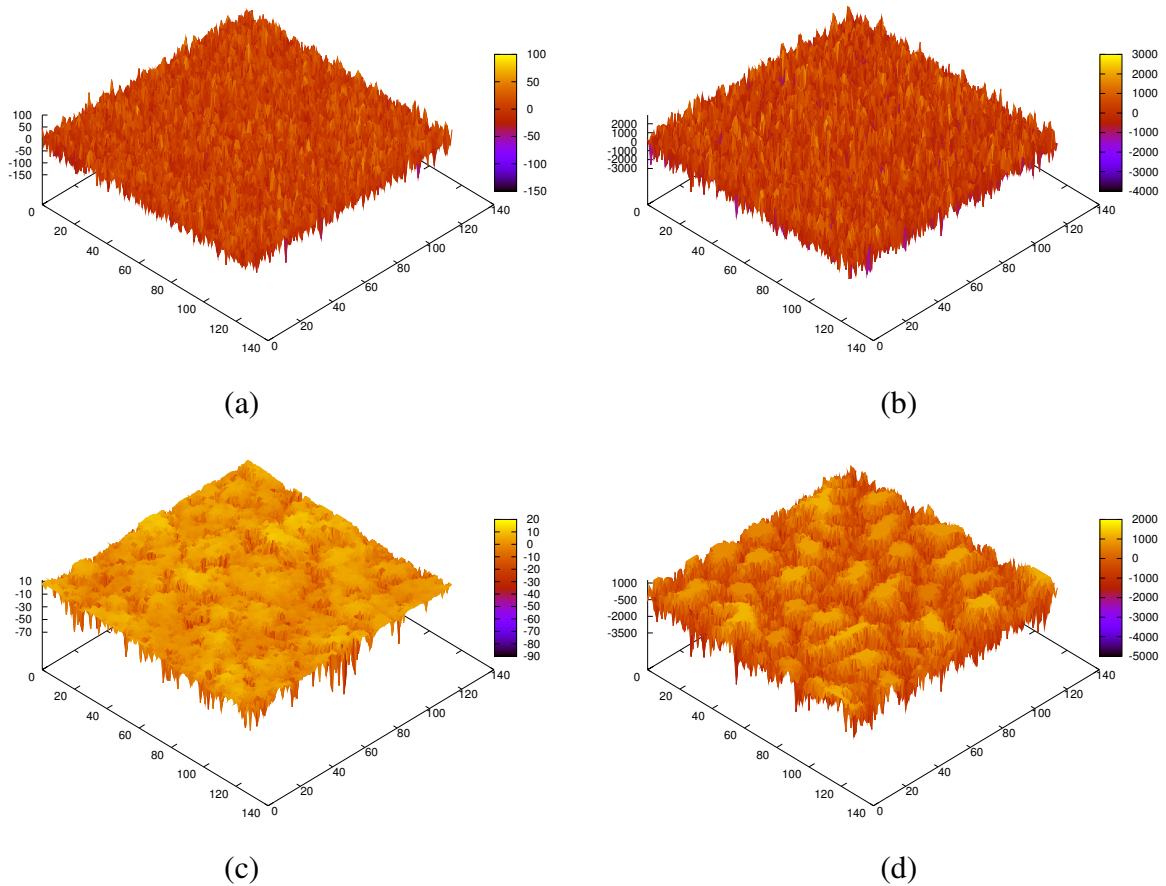


Figura 4.16: Morfologia das superfícies geradas pelo modelo DT com barreira em $d = 2 + 1$ dimensões na rede triangular. Morfologia gerada após a deposição de $10^3 ML$ em (a) e $10^6 ML$ em (b) considerando $n_s = 1$. Morfologia gerada após a deposição de $10^3 ML$ em (c) e $10^6 ML$ em (d) com $n_s = 10$.

A função de correlação para o modelo DT com barreira cinética em $d = 2 + 1$ dimensões é observada na figura 4.17, com (a) $n_s = 1$ e (b) $n_s = 10$ em rede quadrada; e (c) $n_s = 1$ e (d) $n_s = 10$ em rede triangular. Os gráficos apresentam inicialmente um rápido decaimento e para $C(r) > \xi$ observamos que o comportamento não é oscilatório em torno de $C(r) = 0$, o que implica na ausência de superfícies auto-arranjadas que constituem a formação de morros.

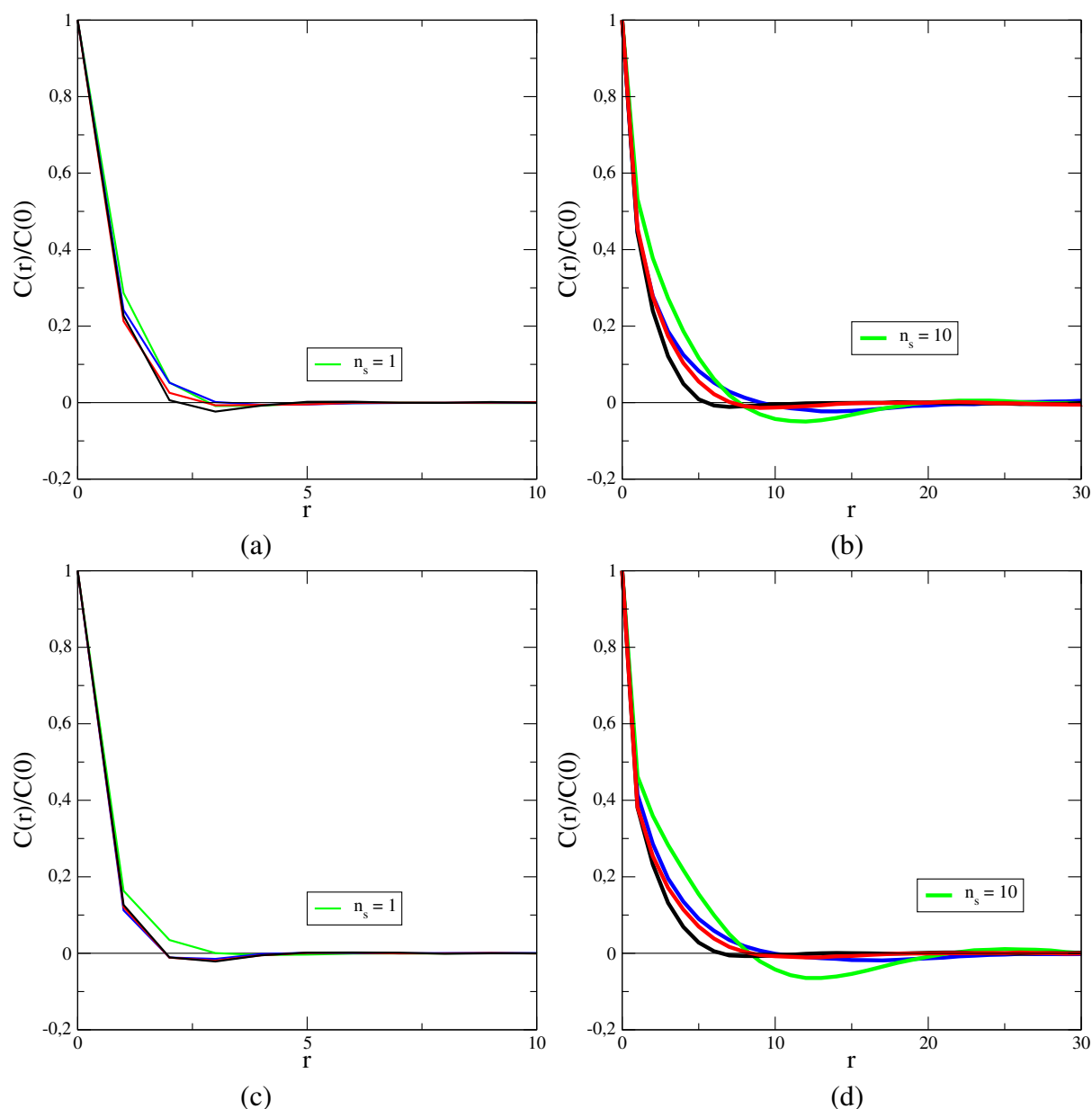


Figura 4.17: Função de correlação altura-altura para o modelo DT com barreira em substratos bi-dimensionais em rede quadrada e triangular. Função de correlação altura-altura com $n_s = 1$ em (a) e $n_s = 10$ em (b) para rede quadrada; e $n_s = 1$ em (c) e $n_s = 10$ em (d) para rede triangular e $t \approx 40, 1.5 \times 10^3, 1.7 \times 10^4, 8.7 \times 10^5$.

A rugosidade e o comprimento característico ξ para o modelo DT com barreira cinética em $d = 2 + 1$ nas redes quadrada e triangular são mostrados na figura 4.18. Podemos observar a diminuição da rugosidade e o aumento do comprimento de correlação quando aumentamos n_s , conforme observado anteriormente. Assim como em $d = 1 + 1$, em $d = 2 + 1$ a evolução temporal da rugosidade exibe uma mudança no expoente de crescimento de um valor inicial que depende do número de tentativas de difusão para um valor assintótico $\beta \approx 0.5$.

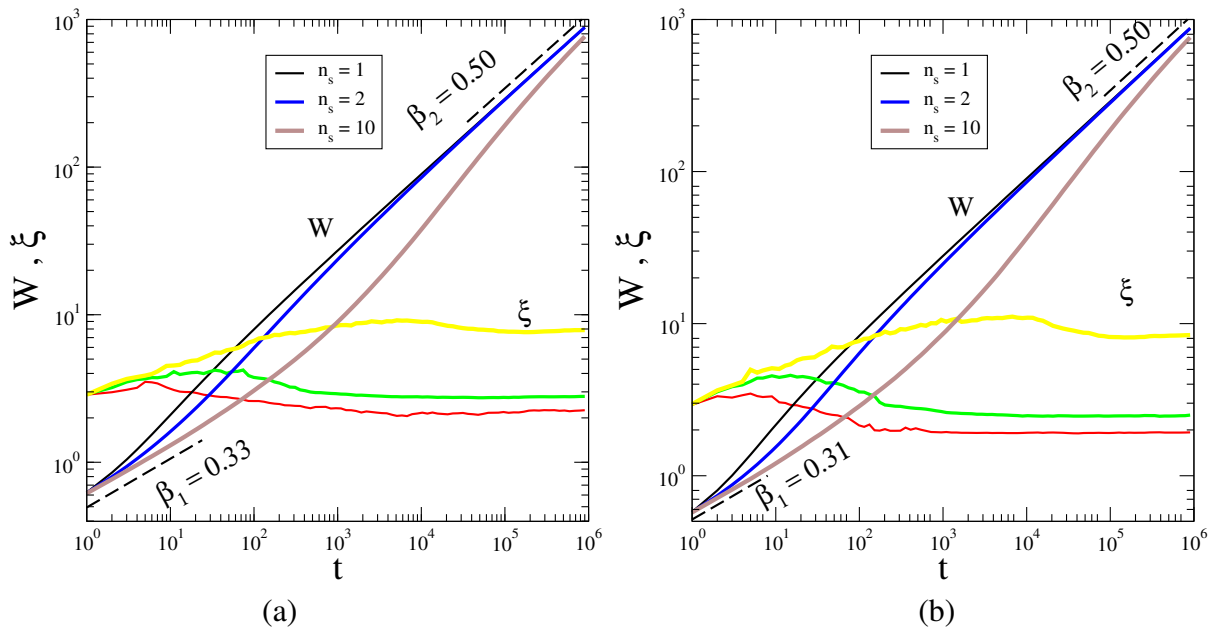


Figura 4.18: Evolução temporal da rugosidade e do comprimento característico para o modelo DT com barreira em substratos bidimensionais em rede (a) quadrada e (b) triangular, com tamanho $L = 128$.

A corrente entre planos para o modelo DT com barreira cinética em $d = 2 + 1$ dimensões nas diferentes redes é representada na figura 4.19 e também apresenta fluxo líquido de corrente entre planos descendente (corrente negativa). Podemos notar que nesse modelo a corrente se aproxima de zero muito mais rápido que no modelo WV em $d = 2 + 1$.

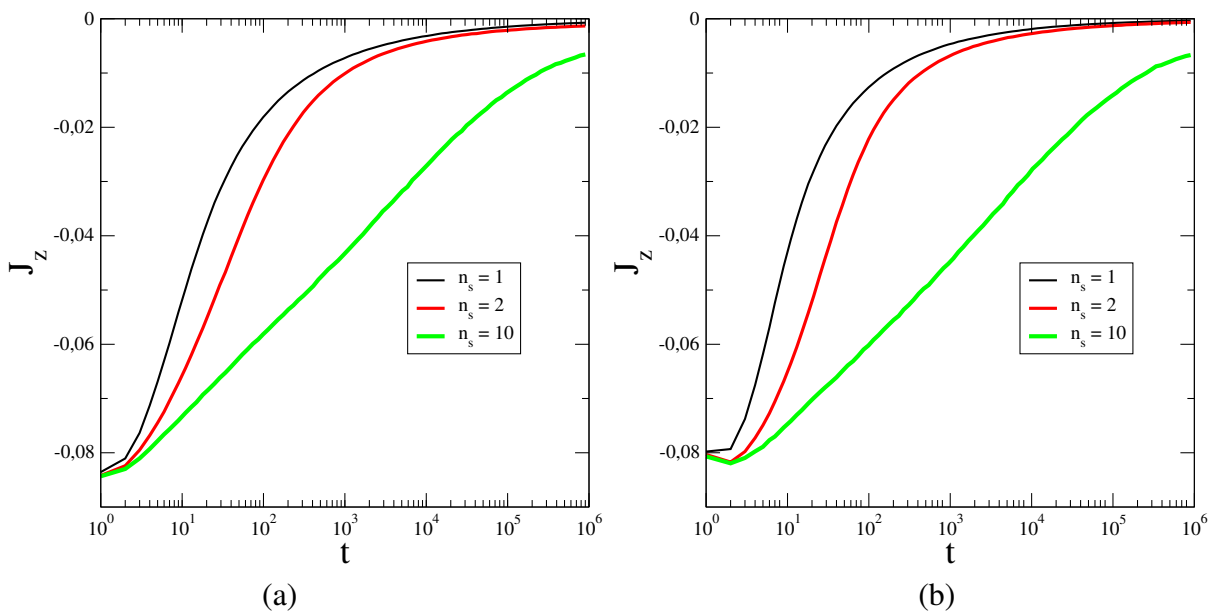


Figura 4.19: Fluxo de partículas perpendicular ao plano do substrato para o modelo DT com barreira em $d = 2 + 1$ dimensões em rede quadrada (a) e triangular (b).

Capítulo 5

Conclusões

A introdução de uma barreira cinética dependente da altura do degrau nos modelos WV e DT produzem interfaces com morfologia caracterizada pela presença de morros auto-arranjados, com padrões típicos dos perfis de filmes finos produzidos por técnicas epitaxiais. O mesmo não é observado para os modelos WV e DT originais, sem a barreira cinética.

A dinâmica de formação destas estruturas foi analisada através da função de correlação altura-altura e da rugosidade da interface. Simulações em $d = 1+1$ e $d = 2+1$ dimensões foram feitas para os modelos WV e DT com barreira cinética e em ambos, encontramos uma mudança no expoente de crescimento β de um valor transitório inicial para um valor constante no limite assintótico $\beta = 1/2$. A presença de estruturas tridimensionais auto-arranjadas, caracterizadas pela formação de morros foram obtidos para o modelo WV em $d = 1+1$ e $d = 2+1$ dimensões. Para o modelo DT com barreira, observamos formação de morros em $d = 1 + 1$ dimensões, no entanto, em $d = 2 + 1$ dimensões não obtivemos a formação de morros auto-arranjados. Observamos uma corrente descendente nos degraus para ambos os modelos, que se aproxima de um valor nulo após um tempo longo, onde esperamos um equilíbrio entre o fluxo de partículas ascendentes e descendentes e além disso, a saturação da largura da interface. As perspectivas para novos trabalhos consistem em novas simulações computacionais, considerando diferentes tamanhos de rede e tempos mais longos e ainda verificarmos se no modelo DT, em $d = 2 + 1$ dimensões, há formação de morros ao considerarmos a difusão quando a partícula possui um ou mais vizinho lateral.

Apêndice A

Dedução da Regra da Barreira Cinética

Apresentamos neste apêndice a dedução da equação 4.1, para difusão entre camadas.

Consideremos uma rede discreta unidimensional contendo $L + 1$ sítios, representada pela figura A.1.

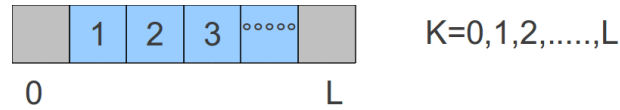


Figura A.1: Ilustração de uma rede discreta unidimensional contendo $L + 1$ sítios.

Para um caminhante aleatório C com probabilidade de passos para direita e esquerda $p_+ = p_- = 1/2$, respectivamente, temos a solução da referência [60] (equações 2.8 e 2.9):

$$q(0|k) = \frac{L - k + w/(w + 1)}{L + \rho/(1 - \rho) + w/(w + 1)} \quad (\text{A.1})$$

e

$$q(L|k) = \frac{k + \rho/(1 - \rho)}{L + \rho/(1 - \rho) + w/(w + 1)} \quad (\text{A.2})$$

em que $q(0|k)$ é a probabilidade do caminhante C estando na posição k alcançar 0, e $q(L|k)$ é a probabilidade do caminhante C estando na posição k alcançar L . Quando a partícula salta para os contornos é refletida ou absorvida com respectivas probabilidades ρ e $(1 - \rho)$ na origem e w e $(w - 1)$ em L .

Vamos considerar primeiramente o caso de uma partícula ao difundir em um degrau ascendente de altura $\Delta h = h_{j'} - h_j$, sendo $h_{j'}$ a altura da partícula na posição $k = L$ e h_j a altura da

partícula na posição $k = 0$, conforme a figura A.2(a).

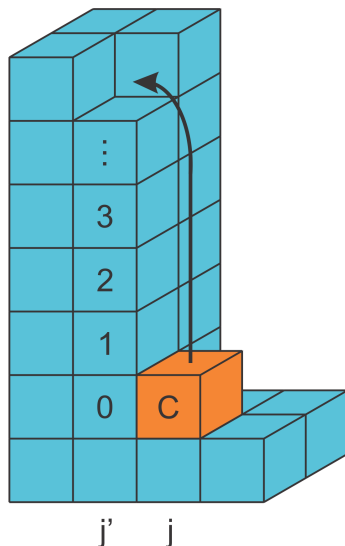


Figura A.2: Ilustração de um degrau multicamadas ascendente contendo $L + 1$ sítios. A partícula inicialmente em um sítio j tenta a difusão para um sítio j' para assumir a posição indicada pela seta.

Consideremos o salto inicial da partícula para a posição “1”, em sua caminhada em direção ao sítio j' de acordo com as regras do modelo WV ou DT. A partir da posição “1” a partícula inicia um passeio aleatório sem tendência ao longo do degrau, até retornar sua posição original ou cruzar todo o degrau. Para este caso, consideremos novamente a figura A.1.

A probabilidade da partícula ser refletida em $k = 0$ é $P_{ref} = 0$ e a probabilidade de ser absorvido é $P_{abs} = 1$, logo $\rho = 0$.

A probabilidade da partícula ser refletida em $k = L$ é $P_{ref} = 0$ e a probabilidade de ser absorvida é $P_{abs} = 1$, logo $w = 0$.

Quando a partícula é absorvida em $k = 0$, retorna a posição de origem e quando é absorvida em $k = L$, cruza o degrau e fixa-se no topo do degrau (no sítio j'). Para encontrar a solução temos $k = 1$, $L = \Delta h$, $\rho = 0$ e $w = 0$ na expressão A.2.

$$P_{\delta h} = \frac{1}{\Delta h} = \frac{1}{h_{j'} - h_j} \quad (\text{A.3})$$

Vamos agora encontrar a probabilidade da partícula descer um degrau tomando por base a figura A.3. Note que desta vez $\Delta h < 0$.

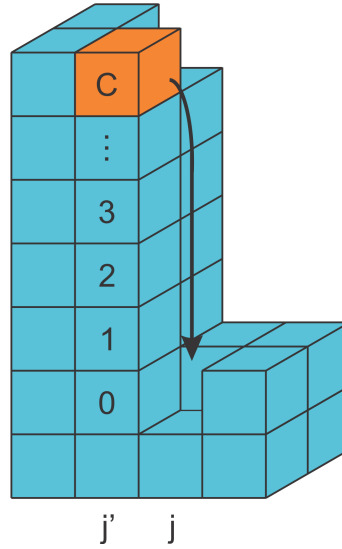


Figura A.3: Ilustração de um degrau multicamadas descendente contendo $L + 1$ sítios. A partícula inicialmente em um sítio j tenta a difusão para um sítio j' para assumir a posição indicada pela seta.

Aqui, novamente consideremos que a partícula mova-se para a posição $h_j - 1$. A partir da posição $k = L - 1$ a partícula inicia um passeio aleatório sem tendência ao longo do degrau, até retornar sua posição original ou cruzar todo o degrau.

Portanto, na equação A.1, fazendo $k = L - 1$ e $L = |\Delta h|$, $\rho = 0$ e $w = 0$ chegamos

$$P_{\delta h} = \frac{1}{|\Delta h|} = \frac{1}{|h_{j'} - h_j|} \quad (\text{A.4})$$

As equações A.3 e A.4 são iguais, portanto para essa regra não importa se a difusão é ascendente ou descendente e podemos escrever

$$P_{\delta h}(i, i') = \begin{cases} 1, & \text{se } |\Delta h| < 2 \\ \frac{1}{|\Delta h|}, & \text{se } |\Delta h| \geq 2 \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Referências Bibliográficas

- [1] T. STEINER; *Semiconductor nanostructures for optoelectronic applications*. Artech House, **424**, 2004.
- [2] M. A. HERMAN, H. STITTER; *Molecular beam epitaxy: Fundamentals and current status- 2nd edition*. Berlin: Springer, 1996.
- [3] M. A. HERMAN, W. RICHTER, H. SITTER; *Physical principles and technical implementation*. Berlin: Springer, 2004.
- [4] J. R. ARTUR; *Molecular beam epitaxy*. Surface Science, **500**, 189, 2002.
- [5] T. MICHELY, J. KRUG; *Islands, Mounds and Atoms: patterns and processes in crystal growth far from equilibrium*. Springer, **61**, 313, 2004.
- [6] J. W. EVANS, P. A. THIEL, M. C. BARTELT; *Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2d islands and 3d mounds*. Surface Science, **61**, 128, 2006.
- [7] A. B. H. HAMMOUDA, A. PIMPINELLI, R. J. PHANEUF; *Anomalous scaling in epitaxial growth on vicinal surfaces: meandering and mounding instabilities in a linear growth equation with spatiotemporally correlated noise*. Surf. Sci. **602**, 2819, 2008.
- [8] S. O. FERREIRA, I. R. B. RIBEIRO, J. SUELE, I. L. MENEZES-SOBRINHO, S. C. FERREIRA, S. G. ALVES; *Effect of temperature on the Hurst and growth exponents of CdTe polycrystalline films*. Appl. Phys. Lett, **88**, 244102, 2006.
- [9] T. TADAYYON-ESLAMI, H. C. KAN, L. C. CALHOUN, R. J. PHANEUF; *Temperature-driven change in the unstable growth mode on patterned GaAs(001)*. Phys. Rev. Lett, **97**, 126101, 2006.
- [10] L. C. JORRITSMA, M. BIJNAGTE, G. ROSENFELD, B. POELSEMA; *Growth anisotropy and pattern formation in metal epitaxy*. Phys. Rev. Lett, **78**, 911, 1997.

- [11] K. J. CASPERSEN, A. R. LAYSON, C. R. SSTOLDT, V. FOURNEE, P. A. THIEL, J. W. EVANS; *Development and ordering of mounds during metal(100) homoepitaxy*. Phys. Rev. B, **65**, 193407, 2002.
- [12] Y. HAN, B. UNA, D. JING, F. QIN, C. J. JENKS, D. J. LIU, P. A. THIEL, J. W. EVANS; *Formation and coarsening of Ag(110) bilayer islands on NiAl(110): STM analysis and atomistic lattice-gas modeling*. Phys. Rev. B, **81**, 115462, 2010.
- [13] M. D. JOHNSON, C. ORME, A. W. HUNT, D. GRAFF, J. SUDIJONO, L. M. SANDER, B. G. ORR; *Stable and unstable growth in molecular beam epitaxy*. Phys. Rev. B, **72**, 116, 1994.
- [14] S. ZORBA, Y. SHAPIR, Y. GAO; *Fractal-mound growth of pentacene thin films*. Phys. Rev. B, **74**, 245410, 2006.
- [15] G. HLAWACEK, P. PUSCHNIG, P. FRANK, A. WINKLER, C. Ambrosch-Drax, C. Teichert; *Characterization of Step-Edge Barriers in Organic Thin-Film Growth*. Science, **321**, 108, 2008.
- [16] R. L. SCHWOEBEL, E. J. SHIPSEY; *Step Motion on Crystal Surfaces*. J. Appl. Phys, **37**, 3682, 1996.
- [17] G. EHRLICH, F. G. HUDDA; *Atomic view of surface self-diffusion: Tungsten on Tungsten*. J. Chem. Phys, **44**, 1039, 1996.
- [18] A. PIMPINELLI, J. VILLAIN; *Physics of crystal growth*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- [19] P. MEAKIN, P. RAMANLALF, L. M. SANDER, R. C. BALL; *Ballistic deposition on surface*. Phys. A, **34**, 5091, 1986.
- [20] A. L. BARABASI, H. E. STANLEY; *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [21] F. F. LEAL, S. C. FERREIRA, S. O. FERREIRA; *Modelling of epitaxial film growth with an Ehrlich-Schwoebel barrier dependent on the step height*. J. Phys. Condens. Matter, **23**, 292201, 2011.
- [22] F. F. LEAL, T. J. OLIVEIRA, S. C. FERREIRA; *Kinetic modelling of epitaxial film growth with up- and downward step barriers*. J. Stat. Mech, P09018, 2001.
- [23] D.E. WOLF, J. VILLAIN; *Growth with surface diffusion*. Europhysics Letters, **13**, 389, 1990.

- [24] S. D. SARMA, P. TAMBORENEA; *A new universality class for kinetic growth: one-dimensional molecular-beam epitaxy*. Phys. Rev. Lett, **66**, 325, 1991.
- [25] B. B. MANDELBROT; *The fractal geometry of nature*. New York: W. H. Freeman, 1982.
- [26] S. G. ALVES; *Leis de Escala e Crossovers em Modelos de Crescimento*. Departamento de Física-UFMG: Tese de doutorado, 2006.
- [27] 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**, 75, 1985.
- [28] M. HENKEL, H. HINRICHSEN, S. LUBECK; *Non-Equilibrium Phase Transitions-Volume I: Absorbing Phase Transitions* Bristol: Springer, 2008.
- [29] S. F. EDWARDS, D. R. WILKINSON; *The surface statistics of a granular aggregates* Proc. R. Soc. Lond, **381**, 17, 1982.
- [30] M. KARDAR, G. PARISI, Y. ZHANG; *Dynamic scaling of growing interfaces*. Phys. Rev. Lett, **56**, 889, 1986.
- [31] K. G. WILSON, J. KOGUT; *The renormalization group and the ϵ expansion*. Phys. Rep,**12**, 75, 1974.
- [32] W. W. MULLINS; *Theory of thermal grooving*. J. Appl. Phys, **28**, 333, 1957.
- [33] Z. W. LAI, S. D. SARMA; *Kinetic growth with surface relaxation: continuum versus atomistic models*. Phys. Rev. Lett, **66**, 2348, 1991.
- [34] J. VILLAIN; *Continuum models for crystal growth from atomic beams with and without desorption*. J. de Physique, **1**, 19, 1991.
- [35] H.J.ERNEST, F. FABRE, R. FOLKERTS, J. LAPUJOLADE; *Observation of a growth instability during low-temperature molecular-beam epitaxy*. Phys. Rev. Lett, **72**, 112, 1994.
- [36] K. THURMER, R. KOCH, M. WEBER, K. H. RIEDER; *Dynamic evolution of pyramid structures during growth of epitaxial Fe(001) films*. Phys. Rev. Lett, **75**, 1767, 1995.
- [37] J. K. ZUO, J. F. WENDELKEN; *Evolution of mound morphology in reversible homoepitaxy on Cu(100)*. Phys. Rev. Lett, **78**, 2791, 1997.
- [38] S. O. FERREIRA, E. C. PAIVA, G. N. FONTES, B. R. A. NEVES; *Characterization of CdTe quantum dots grown on Si(111) by hot wall epitaxy*. J. Applied, **93**, 1195, 2003.

- [39] S. O. FERREIRA, F. F. LEAL, T. E. FARIA, J. E. OLIVEIRA, P. MOTISUKE, E. ABRA-MOF; *Characterization of CdTe Thin Films Grown on Glass by Hot Wall Epitaxy*. Brazilian Journal of Physics, **36**, 317, 2006.
- [40] P. SMILAUER, D. VVEDENSKY; *Coarsening and slope evolution during unstable epitaxial growth*. Phys. Rev. B, **52**, 14263, 1995.
- [41] M. SIEGERT; *Coarsening Dynamics of Crystalline Thin Films*. Phys. Rev. Lett, **81**, 5481, 1998.
- [42] LEI-HAN TANG, P. SMILAUER, D. D. VVEDENSKY; *Noise-assisted mound coarsening in epitaxial growth*. Eur. Phys, **2**, 409, 1998.
- [43] J. KRUG, P. POLITI, T. MICHELY; *Island nucleation in the presence of step-edge barrier: Theory and applications*. Phys. Rev. B **61**, 14037, 2000.
- [44] M. V. R. MURTY, B. H. COOPER; *Influence of step edge diffusion on surface morphology during epitaxy*. Surface Science, **539**, 91, 2003.
- [45] F. FAMILY; *Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion*. J. Phys. A, **19**, 441, 1986.
- [46] F. D. A. A. REIS; *Relaxation to states and dynamical exponents in deposition models*. Phys A, **316**, 250, 2002.
- [47] A. CHAME, F. D. A. A. REIS; *Scaling of local interface with of statistical growth models*. Surface Science **553**, 145, 2004.
- [48] M. J. VOLD; *A numerical approach to the problem of sediment volume*. Journal of Colloid Science, **14**, 168, 1956.
- [49] S. G. ALVES, S.C. FERREIRA; *Aggregation in a mixture of Brownian and ballistic wandering particles*. Phys. Rev. E , **73**, 051401, 2006.
- [50] F. D. A. AARÃO REIS; *Universality and corrections to scaling in the ballistic deposition model*. Phys. Rev. E , **63**, 056116, 2001.
- [51] J. M. KIM, J. M. KOSTERLITZ; *Growth in a restricted solid-on-solid model*. Phys.Rev.Lett, **62**, 2289, 1989.
- [52] C. S. RYU, I. MOOK. KIM; *Crossover behaviours in a molecular-beam epitaxial growth model*. Phys. Rev. E, **51**, 3069, 1995.

- [53] S. D. SARMA, P. P. CHATRAPORN, Z. TOROCZKAI; *Universality class of discrete solid-on-solid limited mobility nonequilibrium growth models for kinetic surface roughening*. Phys. Rev. E, **65**, 036144, 2002.
- [54] J. KRUG, M. PLISCHKE, M. SIEGERT; *Surface diffusion currents and the univerlaty classes of growth*. Phys. Rev. Lett, **70**, 3271, 1993.
- [55] B. S. COSTA, J. A. R. EUZÉBIO, F. D. A. A. REIS; *Finite-size effects on the growth models of Das Sarma and Tamborenea and Wolf and Villain*. Physica A, **328**, 193, 2002.
- [56] D. D. VVEDENSKY; *Crossover and univerlality in the Wolf-Villain model*. Phys. Rev. E, **68**, 010601, 2003.
- [57] M. KOTRLA, A. C. LEVI, P. SMILAUER; *Roughness and nonlinearities in $(2 + 1)$ -dimensional growth-models with diffusion*. Europhysics. Lett, **20**, 25, 1992.
- [58] S. G. ALVES, J. G. MOREIRA; *Transitions in a probabilistic interface growth model*. J. Stat. Mech, P0422, 2011.
- [59] S. D. SARMA, P. PUNYINDU, Z. TOROCZKAI; *Non-universal mound formation in non-equilibrium surface growth*. Surf. Scien. Lett, **457**, 369, 2000.
- [60] M. A. EL-SHEHAWAY; *Absorption probabilities for a random walk between two partially absorbing boundaries*. J. Phys. A , Math. Gen, **33**, 9005, 2000.
- [61] S. D. SARMA, P. PUNYINDU; *A discrete model for non-equilibrium growth under surface diffusion bias*. Surf. Scien. Lett, **424**, 339, 1999.
- [62] S. V. GHASAS; *Mounding formation and incoherent surface kinetics*. Phys. Rev. E, **67**, 1061, 2003.