

ISMAEL SEGUNDO DA SILVA CARRASCO

ESTUDO DE MODELOS DE CRESCIMENTO DISCRETOS
EM SUBSTRATOS QUE CRESCEM LATERALMENTE

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*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS – BRASIL
2014

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

T

C311e
2014 Carrasco, Ismael Segundo da Silva, 1985-
Estudo de modelos de crescimento discretos em
substratos que crescem lateralmente. / Ismael Segundo da
Silva Carrasco. - Viçosa, MG, 2014.
x, 89f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui apêndices.

Orientador : Tiago José de Oliveira.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de
Viçosa.

Referências bibliográficas: f.83-89.

1. Simulação matemática. 2. Simulação em Monte
Carlo. 3. Modelos de crescimento. 4. Sistemas KPZ.
I. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física.
Programa de Pós-graduação em Educação Física. II. Título.

CDD 22. ed. 511.8

ISAMAEL SEGUNDO DA SILVA CARRASCO

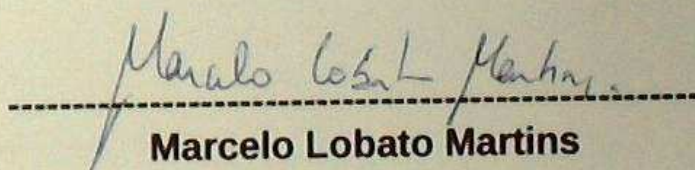
ESTUDO DE MODELOS DE CRESCIMENTO DISCRETOS EM SUBSTRATOS
QUE CRESCEM LATERALMENTE

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: 20 de fevereiro de 2014.



Wagner Figueiredo



Marcelo Lobato Martins



Tiago José de Oliveira
(Orientador)

Agradecimentos

Expresso aqui meus sinceros agradecimentos a todas as pessoas que de alguma forma me ajudaram a conquistar mais esta etapa da vida. Obrigado a todos da minha família pelo apoio, em especial ao meu irmão Rafael pela ajuda nas revisões desse texto. Obrigado aos meus amigos pelos momentos de lazer e descontração. Obrigado a Lucimar, por todo amor e carinho durante todos estes anos.

Obrigado ao Tiago (orientador) pela paciência e colaboração durante esses anos. Obrigado também ao Sílvio (co-orientador) pelos conselhos nesse trabalho e pelos incentivos durante a minha graduação.

Finalmente, agradeço às agencias nacionais que auxiliam pesquisa, FAPEMIG, CNPq e, em especial, a CAPES pelo financiamento da minha bolsa.

Sumário

Lista de figuras	vi
Resumo	vii
Abstract	ix
1 Introdução	1
2 Conceitos básicos em dinâmica de interface	5
2.1 Fractais e auto-afinidade	5
2.2 Escala dinâmica da rugosidade	9
2.3 Classes de universalidade na dinâmica de interfaces	13
2.3.1 Equações estocásticas e princípios de simetria	14
2.3.2 Deposição aleatória (RD)	16
2.3.3 A classe de Edwards–Wilkinson(EW)	17
2.3.4 A classe de Kardar–Parisi–Zhang(KPZ)	20
2.4 Distribuições de alturas	21
3 Interfaces curvas e a aproximação de domínios crescentes	29
3.1 Crescimento de interfaces curvas	29
3.2 Domínios crescentes	33
4 Modelos discretos para o crescimento lateral e vertical da interface	36
4.1 Crescimento lateral do substrato	36
4.2 Modelos discretos da classe KPZ	40

4.2.1	<i>Restricted solid on solid (RSOS)</i>	40
4.2.2	<i>Etching</i>	41
4.2.3	<i>Single-step</i>	43
4.3	Outros modelos	44
5	Resultados em uma dimensão	46
5.1	Expoente de crescimento	46
5.2	Distribuições de alturas	47
5.3	Efeitos das duplicações e origem das correções	54
5.4	Crossover de GOE para GUE	63
6	Resultados em duas dimensões	65
6.1	Parâmetros não universais	65
6.2	Expoente de crescimento	68
6.3	Distribuições de alturas	70
6.4	Comparação com o caso unidimensional	75
7	Conclusões e Perspectivas	77
A	Limite gaussiano da distribuição binomial	79
B	Uma propriedade simples de funções periódicas	82

Lista de Figuras

2.3	(a) Ilustração do processo recursivo de formação do triangulo de Sierpinski. (b) Objeto obtido depois de um número grande de iterações. Figura extraída de [23].	7
2.6	Comportamentos típicos:(a) da rugosidade de saturação em função do tamanho do sistema, (b) do tempo de saturação em função do tamanho do sistema.	12
2.11	(a) Distribuição de alturas da eletro-convecção de cristais líquidos comparadas com as previsões teóricas. A curva tracejada é a GUE e a pontilhada a GOE. Os símbolos preenchidos azuis e vermelhos foram obtidos para interfaces circulares com tempos $t = 10s$ e $t = 30s$ respectivamente. Já os símbolos não preenchidos azuis e púrpuros foram obtidos para crescimentos planos com tempos $t = 20s$ e $t = 60s$ respectivamente. Figura extraída de [51]. (b) Gráfico da <i>skewness</i> (círculos) e curtose (cruzes) do crescimento curvo (azul) e plano (vermelho). O Gráfico mostra que a diferença entre as distribuições em (a) é um deslocamento na média, pois a <i>skewness</i> e a curtose convergem para os resultados analíticos de [11].	25
4.6	(a) Gráfico utilizado na estimativa do valor de v_∞ . Esse valor foi obtido extrapolando diversos ajustes realizados na região de $t^{-2/3}$ pequenos. (b) Estimativa do valor de Γ . Para isso diversas leis de potência foram ajustadas na região de tempos grandes.	42

5.1	Expoente de crescimento dos modelos (a) RSOS e (b) <i>Etching</i> para diferentes velocidades laterais. As linhas tracejada são correspondentes a $\beta = 1/3$	47
5.2	Gráficos da (a) <i>Skewness</i> e da (b) Curtose em função de $t^{-2\beta}$ da distribuição de alturas do modelo <i>Single-step</i> em substratos que crescem lateralmente.	48
5.3	Calculo da correção $\zeta t^{-\beta-1}$ usando a média da (a) GOE e da (b) GUE.	49
5.4	Gráficos de ζ para as diferentes velocidades dos modelos (a) RSOS, (b) <i>Etching</i> e (c) <i>Single-step</i>	50
5.5	Cálculo do desvio da distribuição (a) sem considerar o $\zeta \ln t$, e em (b) considerando essa correção.	51
5.6	Gráficos de $\langle \eta \rangle$ para as diferentes velocidades dos modelos (a) RSOS, (b) <i>Etching</i> e (c) <i>Single-step</i>	52
5.7	(a) Gráfico que mostra o caráter determinístico de ζ . (b) Curva que mostra a existência de correções de ordem maior em 5.4 e que $\langle \eta^2 \rangle_c \neq 0$	53
5.11	(a) Gráfico de $\langle (\vec{\nabla} h)^2 \rangle$ em função do tempo para substratos de tamanho fixo, curva preta (círculos), e substratos crescentes, curva vermelha (quadrados). (b) Número de partículas depositadas dividido pelo número total de partículas que tentaram ser depositadas. Curva vermelha (quadrados) está associada ao caso crescente e a preta (círculos) para substratos com tamanho fixo. A linha azul tracejada é o valor de v_∞ do modelo SOS.	58
5.12	Gráfico de evolução da altura média para os modelos (a) <i>Single-step</i> e (b) <i>Etching</i> com substrato de tamanho fixo, curva preta, e substrato crescendo com velocidade $v_w = 100$, curva vermelha.	60
5.15	Gráfico da (a) <i>skewness</i> e da (b) curtose para diferentes tamanhos iniciais. A curva para $L_0 = 20$ em função de L/L_0 não ficaria visível nessa escala, por isso ela está em função de $t/640$ nos dois gráficos.	64

6.2	(a) Velocidade de crescimento para diferentes tamanhos de sistema. A linha tracejada é o valor de v_∞ . (b) Gráfico de Δv em função de $1/L^{2-2\alpha}$. O coeficiente angular dessa reta é igual a $-\lambda A/2$	68
6.3	Expoente de crescimento em função do tempo para diferentes velocidades dos modelos (a) <i>Single-step</i> , (b) <i>Etching</i> e (c) RSOS. A linha tracejada representa o valor $\beta = 0,24$, que é o valor do expoente da classe KPZ em duas dimensões.	69
6.4	Estimativa da (a) <i>skewness</i> e da (b) curtose da distribuição de alturas usando o modelo <i>Single-step</i>	70
6.5	(a) Gráficos para o calculo do valor de g_1 . A curva com quadrados foi traçada sem considerar nenhuma correção e a com círculos após cinco passos da iteração.(b) Gráficos para a determinação da correção. A curva com quadrados foi traçada considerando o primeiro g_1 calculado e a com círculos utilizando o valor final de g_1	71
6.6	Gráficos de ζ para as diferentes velocidades dos modelos (a) RSOS, (b) <i>Etching</i> e (c) <i>Single-step</i>	72
6.7	(a) Gráfico que mostra a impossibilidade de se calcular ζ para a velocidade $v_w = 2$. (b) Curva de $g_1 t^{\beta-1}$ para as velocidades $v_w = 2$ (círculos) e $v_w = 6$ (quadrados).	73
6.8	Gráficos de $\langle \eta \rangle$ para as diferentes velocidades dos modelos (a) RSOS, (b) <i>Etching</i> e (c) <i>Single-step</i>	74

Resumo

CARRASCO, Ismael Segundo da Silva. M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2014. **Estudo de modelos de crescimento discretos em substratos que crescem lateralmente.** Orientador: Tiago José Oliveira. Coorientadores: Sílvio Costa Ferreira Júnior e Sidiney Geraldo Alves.

A dinâmica de interfaces curvas é, em geral, mais difícil de estudar, tanto analítica quanto computacionalmente, que as planas. Isto tem motivado trabalhos considerando modelos típicos de crescimento plano em substratos que crescem lateralmente ao longo do tempo como uma primeira abordagem para analisar interfaces verdadeiramente curvas. Entretanto, todos estes estudos basearam-se em cálculos de expoentes de escala da rugosidade e, portanto, não demonstram conclusivamente se esta simplificação leva a uma dinâmica similar à das superfícies curvas. Para esclarecer este ponto, nós estudamos modelos onde a deposição de partículas e o crescimento lateral do substrato são realizados estocasticamente de acordo com suas respectivas probabilidades. Este método permite-nos estudar qualquer modelo discreto de crescimento em substratos que aumentam lateralmente. Entretanto, aqui nós nos restringimos a modelos na classe Kardar-Parisi-Zhang (KPZ), onde as distribuições de alturas das superfícies são diferentes para interfaces curvas e planas. Nós obtivemos que assintoticamente estas distribuições são dadas pelas distribuições das interfaces curvas, tanto em substratos unidimensionais quanto bidimensionais. No último caso, onde a forma analítica da distribuição de altura não é conhecida exatamente, nós obtivemos estimativas precisas dos seus primeiros cumulantes e confirmamos sua universalidade. Surpreendentemente, correções logarítmicas foram encontradas no KPZ “ansatz” para as distribuições de alturas, que não existem nos mesmos modelos em substratos estáticos. A origem destas

correções foi explicada como um efeito das duplicações de colunas no crescimento lateral do substrato. Iniciando o crescimento em substratos grandes, um crossover foi encontrado nas distribuições de alturas de plano para curvo.

Abstract

CARRASCO, Ismael Segundo da Silva. M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, february 2014. **Study of models of discrete growth on substrates that grow laterally.** Adviser: Tiago José Oliveira. Co-Advisers: Sílvio Costa Ferreira Júnior and Sidiney Geraldo Alves.

The dynamics of curved interfaces is, in general, more difficult to study, both analytically and computationally, than the flat ones. This has motivated some works considering typical flat growth models on substrates which grow laterally in time, as a first approach for analyze truly curved interfaces. However, all these studies were based on the calculation of scaling exponents, from the roughness dynamic scaling, and, thus, they do not show conclusively if this simplification leads to a dynamic similar to the one of curved surfaces. In order to clarify this point, we study models where particle deposition and lateral growth of the substrate are stochastically performed accordingly to their respective probabilities. This method allows us to study any discrete growth model on growing substrates. However, here we restrict ourselves to models in Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) class, where surface height distributions are different for curved and flat interfaces. We found that asymptotically these distributions are given by the ones of curved interfaces, in one- as well as in two-dimensional substrates. In the last case, where the analytical form of the height distributions are not known exactly, we obtain accurate estimates of their first cumulants and confirm their universality. Surprisingly, logarithmic corrections were found in the KPZ ansatz for the height distributions, which do not exist for the same models on static substrates. The origin of these corrections was explained as an effect of the duplication of columns in the lateral growth of the substrate. Starting the growth on large substrates, a crossover was found

in the height distributions from flat to curved ones.

Capítulo 1

Introdução

A evolução de uma interface que separa dois meios distintos é um importante problema de física estatística fora do equilíbrio, isso porque esse tipo de sistema é muito comum na natureza. Exemplos simples seriam: frente de chamas [1] e fluxo de líquido em um meio poroso [2]. Além desses, podemos citar fenômenos de importante aplicação tecnológica, como a deposição de filmes finos [3]. Superfícies também estão presentes em sistemas biológicos, como crescimento de colônia de bactérias [4] e tumores [5], muito relevantes do ponto de vista médico. Outras aplicações podem ser encontradas em [6].

Um exemplo de filmes finos que podemos citar a título de ilustração é o telureto de cádmio (CdTe) crescido sobre silício [7]. O CdTe possui propriedades que são interessantes para aplicações tecnológicas. Uma delas é o gap de energia direto $E_g = 1,528\text{eV}$ à 300K, onde essa energia é relacionada a luz com comprimento de onda da ordem de 827nm. Além disso, ele possui um alto coeficiente de absorção óptica, da ordem de $5 \times 10^5\text{cm}^{-1}$. Essas propriedades semicondutoras e ópticas tornam esse composto muito útil na fabricação de dispositivos opto eletrônicos e fotovoltaicos. Na figura 1.1 apresentamos duas imagens de AFM que mostram como um filme de CdTe fica mais rugoso a medida que mais partículas são depositadas. Mais detalhes sobre esse sistema podem ser encontrados em [8].

Em sistemas biológicos é muito comum que as interfaces sejam curvas. Um exemplo ilustrativo seria uma cultura de células tumorais, como na figura 1.2. Esse

1 Introdução

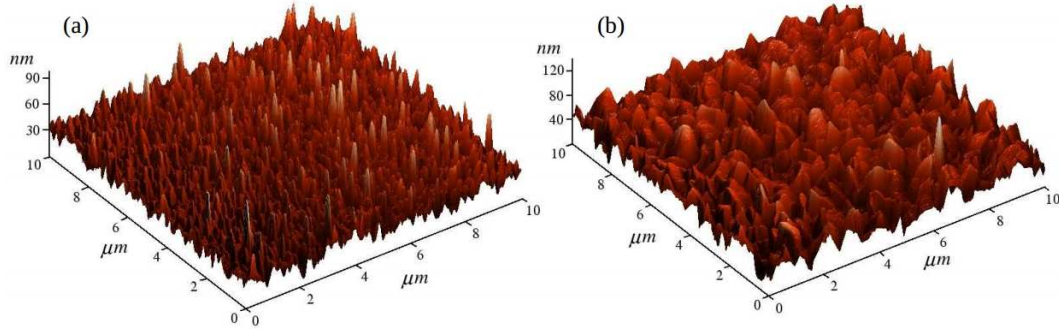


Figura 1.1: Imagens de AFM de CdTe/Si(001) obtidas no laboratório de nanoscopia da UFV. (a) Crescimento com $t = 60\text{min}$ e (b) $t = 240\text{min}$. Figura extraída de [9].

tipo de interface é mais difícil de tratar tanto analiticamente quanto em simulação. As equações diferenciais relacionadas à dinâmica são mais complicadas em geometria curva, dificultando o tratamento analítico [13]. Computacionalmente, modelos clássicos como o de Eden [10], crescidos em redes, produzem superfícies que apresentam anisotropias, perdendo a simetria sob rotação [14,15]. Por isso, a análise estatística deve se limitar a alguns pontos equivalentes da interface, desperdiçando, de certa forma, o tempo de simulação necessário para gerar uma superfície inteira. Para contornar esse problema, uma opção é fazer o crescimento fora de rede, onde, apesar de haver várias formas de se implementar [16–18], normalmente esses crescimentos exigem algoritmos complexos que ficam cada vez mais difíceis de se implementar a medida que aumentamos as dimensões da interface. Assim notamos que interfaces curvas são de fato mais complicadas que as planas do ponto de vista teórico.

Duas características exclusivas das interfaces curvas são: crescimento da área da interface e curvatura não nula da superfície. Por causa das dificuldades presentes no estudo de crescimentos curvos, tem sido proposto em trabalhos analíticos [19] e em simulação [20,21] uma abordagem simplificada envolvendo domínios crescentes. Nesse tipo de interface, consideramos um substrato plano com condições de contorno periódicas que cresce lateralmente com o tempo, ou seja, temos uma superfície de área crescente, porém, sem curvatura macroscópica. Dessa forma, o domínio crescente pode ser visto como um meio termo entre os casos plano e curvo.

1 Introdução

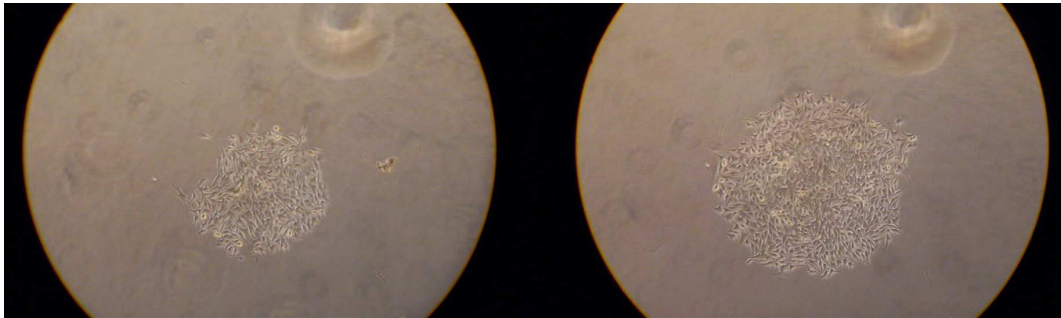


Figura 1.2: Imagem de uma cultura de células tumorais obtida via microscopia óptica no laboratório de física biológica da UFV, cortesia de Tiago Venzel.

Alguns dos avanços alcançados na última década chamaram a atenção para a classe de universalidade Kardar–Parisi–Zhang (KPZ), onde as distribuições de alturas (HDs) em $d=1+1$ foram obtidas exatamente [11]. Foi mostrado por Prähofer e Spohn que as HDs estão relacionadas com as distribuições Tracy-Widom da teoria de matrizes aleatórias. Eles obtiveram que nos casos planos a distribuição é dada pelo ensemble gaussiano ortogonal (GOE)-(Gaussian orthogonal ensemble), e nos curvos pelo ensemble gaussiano unitário (GUE)-(Gaussian unitary ensemble). Dessa forma, podemos dizer que a classe KPZ se subdivide de acordo com a geometria da interface. Além desses avanços, experimentos precisos foram realizados utilizando turbulência em cristal-líquido por Takeuchi [12], onde foram confirmados os resultados teóricos.

Existe uma discussão sobre a aplicabilidade da análise de escala em interfaces curvas [29–32]. Interessados em resolver esse impasse, os pesquisadores que estudaram os domínios crescentes se preocuparam principalmente com a análise de escala da rugosidade [19–21]. No entanto, onde a análise de escala funciona, não há distinção entre o caso curvo e o plano, pois os expoentes críticos são os mesmos. Como dito anteriormente, essa distinção pode ser feita estudando as HDs de modelos na classe KPZ, pois elas diferem do curvo para o plano. Dessa forma, seria interessante estudar as HDs em domínios crescentes, isso a fim de analisar se elas são iguais ao caso curvo ou ao plano, ou ainda se diferem de ambos e, assim, saber se o domínio crescente é uma aproximação razoável para interfaces curvas.

Nesta dissertação estudamos diversos modelos discretos de crescimento em sub-

1 Introdução

stratos que crescem com o tempo, ou seja, a cada unidade de tempo o número de sítios da rede aumenta. Utilizando algoritmos que desenvolvemos em $(1 + 1)d$ e $(2 + 1)d$, estudamos a dinâmica dos quatro primeiros cumulantes das HDs para diferentes taxas de crescimento. Nossos resultados mostraram que apesar de haver fortes correções na sua dinâmica, os cumulantes convergem assintoticamente para os cumulantes da GUE no caso $(1 + 1)d$, ou seja, para a distribuição da geometria curva. Em duas dimensões, apesar das distribuições curva e plana ainda não terem sido calculadas analiticamente, os valores dos primeiros cumulantes delas foram obtidos numericamente [26–28]. Para substratos bidimensionais, também obtivemos que os cumulantes convergem assintoticamente para o caso curvo.

Nos trabalhos [20,21], seus autores afirmam que o tamanho inicial do sistema não altera de forma significativa a dinâmica dos domínios crescentes. No entanto, nós observamos que se o tamanho inicial do sistema é relativamente grande, as HDs tendem primeiro a GOE e sofrem um *crossover* para GUE, ou seja, temos um *crossover* de plano para curvo dependente do tamanho inicial do sistema.

Capítulo 2

Conceitos básicos em dinâmica de interface

Nesse capítulo vamos introduzir os principais conceitos necessários para se compreender o trabalho realizado. Iniciaremos descrevendo brevemente objetos fractais, onde ficará clara uma simetria muito importante no estudo de interfaces. Em seguida discutiremos a escala dinâmica da rugosidade, que é a propriedade superficial mais utilizada para se caracterizar a dinâmica de interfaces. Depois vamos introduzir o conceito de universalidade no crescimento de superfície, dando maior ênfase a classe KPZ, que será o foco do nosso trabalho. Para finalizar o capítulo iremos apresentar as principais propriedades das distribuições de alturas, que também são muito úteis na caracterização de interfaces, além de serem o ponto fundamental do nosso estudo.

2.1 Fractais e auto-afinidade

Na geometria euclidiana existem definições de diversas formas geométricas, como cubos, círculos, pentágonos e outros. No entanto, nem sempre os objetos encontrados na natureza podem ser aproximados por essas formas idealizadas. Por causa da complexidade envolvida na formação de alguns sistemas, podem aparecer irregularidades que não são tratáveis na geometria definida por Euclides. Essas estruturas exigem um formalismo matemático mais geral para serem estudadas. Benoit Mandelbrot chamou

2.1 Auto-afinidade

esses objetos complexos de fractais e iniciou o desenvolvimento desse formalismo. As suas principais ideias podem ser encontradas em [22] e uma revisão de alguns conceitos em [23].

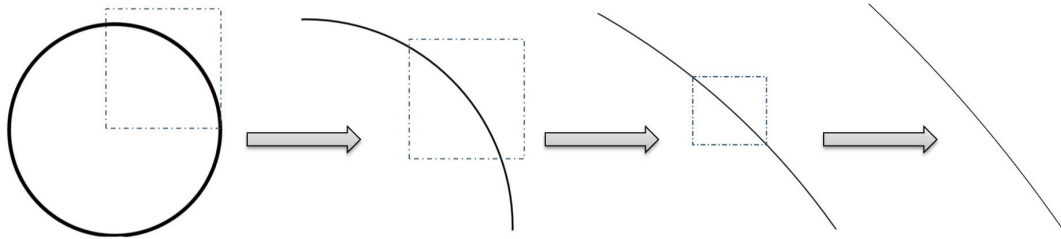


Figura 2.1: Objeto euclidiano observado em diferentes escalas.

De maneira simplificada, podemos diferenciar objetos fractais dos euclidianos analisando o efeito de mudanças da escala de observação sobre sua forma. Considere um círculo como exemplo. À medida que observamos uma porção do círculo com cada vez mais magnificação, ela vai tornando-se mais suave. Quanto maior a magnificação, menor parece ser a curvatura do arco, como na figura 2.1, isso até o limite em que o arco se torna uma reta. Já as estruturas fractais não se suavizam à medida em que são observadas em escalas cada vez menores. Esses objetos são na verdade invariantes sobre mudanças de escala.

Uma mudança de magnificação pode ser vista matematicamente como uma transformação de escala. Pensando em um sistema de coordenadas cartesiano, essa transformação seria equivalente a multiplicar cada eixo por uma constante, chamada fator de escala. Quando utilizamos a mesma constante em todos os eixos, temos uma transformação isotrópica, se for o contrário ela é dita anisotrópica. Objetos invariantes sobre mudanças isotrópicas de escala são chamados de auto-similares, no caso anisotrópico são conhecidos como auto-afins. Na figura 2.2 temos uma estrutura auto-afim. Note como a cada nova ampliação o objeto parece mais achatado, isso porque ele exige uma transformação com fator de escala diferente em cada eixo para que ele mantenha as mesmas características.

Para ilustrar melhor o que é um fractal vamos usar como exemplo o triângulo de

2.1 Auto-afinidade

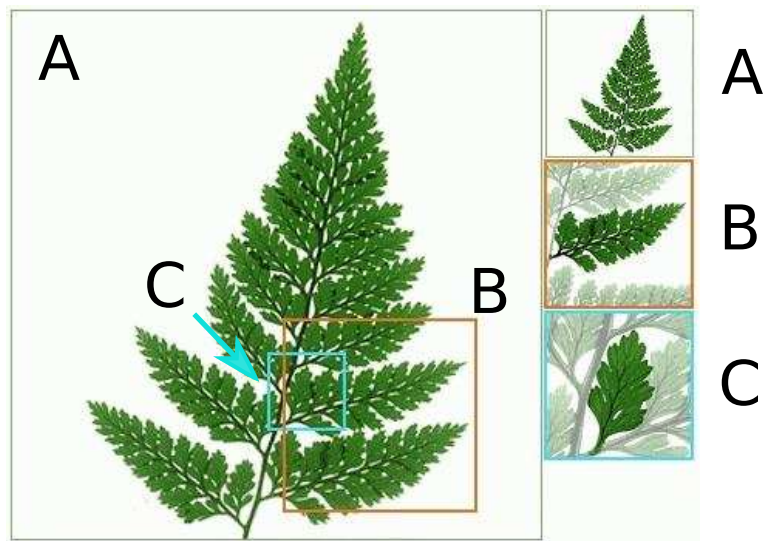


Figura 2.2: Objeto fractal observado em diferentes escalas. Figura extraída de matematicanacidadela.blogspot.com.br

Sierpinski. Esse fractal é obtido através de uma regra recursiva. Tomamos inicialmente um triângulo equilátero de lado igual a um. Em seguida, retiramos um triângulo formado pelos segmentos que unem os pontos médios dos lados do triângulo inicial. A cada passo removemos um triângulo equilátero do centro de cada triângulo, como na figura 2.3(a). Após um número grande de iterações obtemos a figura 2.3(b). Note que o objeto é auto-similar, se ampliamos um dos triângulos da figura 2.3(b) iremos obter a mesma figura novamente.

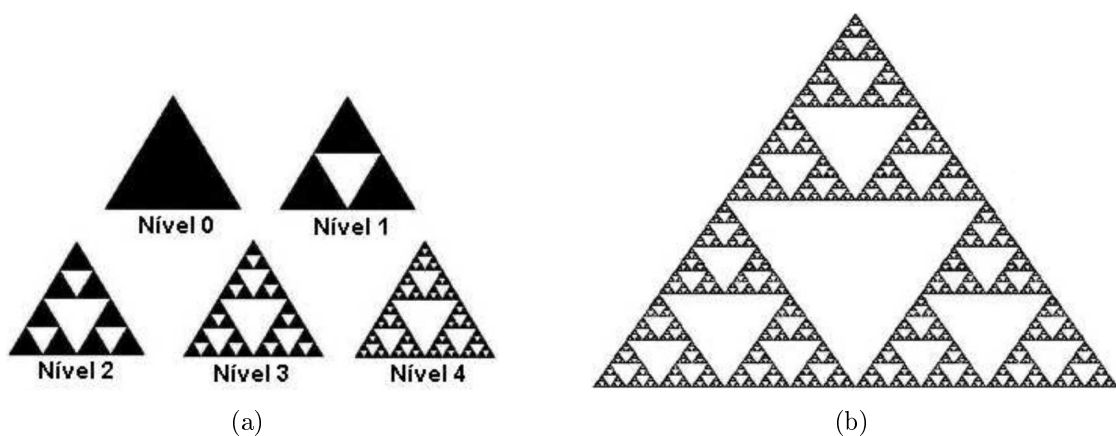


Figura 2.3: (a) Ilustração do processo recursivo de formação do triângulo de Sierpinski. (b) Objeto obtido depois de um número grande de iterações. Figura extraída de [23].

2.1 Auto-afinidade

Analisando o triângulo de Sierpinski podemos evidenciar uma característica muito intrigante dos objetos fractais: eles não podem ser completamente descritos pelas dimensões euclidianas. Vamos inicialmente tentar calcular a sua área. No nível zero sua área é $A_0 = \sqrt{3}/4$. No passo seguinte retiramos um triângulo de área $\frac{1}{2^2} \frac{\sqrt{3}}{4}$. No nível dois iremos remover três triângulos de área $\frac{1}{4^2} \frac{\sqrt{3}}{4}$. É simples mostrar que no passo N a área é

$$A_N = A_0 - \frac{\sqrt{3}}{12} \sum_{i=1}^N \left(\frac{3}{4}\right)^i. \quad (2.1)$$

Se $N \rightarrow \infty$ a soma $\sum_{i=1}^N \left(\frac{3}{4}\right)^i \rightarrow 3$, e assim a área total do triângulo de Sierpinski tende para zero. Por isso podemos dizer que esse objeto não possui duas dimensões, já que sua área é nula.

Agora vamos calcular o perímetro. No nível zero o perímetro é três. No segundo passo teremos três triângulos de lado $1/2$. No nível dois temos nove triângulos de lado $1/4$. Assim podemos calcular o perímetro no passo N multiplicando o número de triângulos, 3^N , pelo perímetro de cada triângulo, $3/2^N$, resultando em

$$P_N = 3^N \frac{3}{2^N} = 3 \left(\frac{3}{2}\right)^N. \quad (2.2)$$

Dessa forma, quando $N \rightarrow \infty$ o perímetro $P_N \rightarrow \infty$. Assim o triângulo de Sierpinski não pode ser medido em uma dimensão.

Notemos que o triângulo de Sierpinski não pode ser descrito por duas dimensões, pois sua área se anula, e também não pode ser descrito por uma única dimensão, pois seu perímetro diverge. Assim, é como se esse objeto possuísse um número de dimensões fracionário, entre uma e duas dimensões euclidianas. Daí vem o nome de fractal, já que ele não pode ser mensurado pelas dimensões inteiras definidas por Euclides. No formalismo desenvolvido por Mandelbrot, podemos calcular a dimensão fractal do triângulo de Sierpinski, de acordo com [6,23],

$$d_f = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln S(l)}{\ln 1/l}, \quad (2.3)$$

onde $S(l)$ é o número de triângulos de lado l necessários para recobrir todo o objeto de

2.2 Escala dinâmica da rugosidade

Sierpinsk. Como já vimos pelos cálculos da área e do perímetro, no nível N o número de triângulos é 3^N e o lado deles é $(1/2)^N$. Usando isso na eq. 2.3 teremos

$$d_f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln 3^N}{\ln 2^N} = \frac{\ln 3}{\ln 2} \approx 1,5850. \quad (2.4)$$

Assim notamos que, de fato, a dimensão fractal do triângulo de Sierpinsk é $1 < d_f < 2$.

O triângulo de Sierpinsk é um exemplo de fractal determinístico, pois é produzido por uma regra recursiva. Uma ampliação da figura leva a uma reprodução idêntica do objeto, assim sua auto-similaridade é exata. Na natureza, encontramos objetos auto-similares ou auto-afins em um sentido menos rígido. Por exemplo, se tomamos a folha da figura 2.2, podemos notar que um ramo extraído dela se parece com a folha inteira, no entanto, esse pequeno ramo não é uma reprodução idêntica do objeto como um todo. Em interfaces, se temos uma superfície auto-afim, estamos dizendo que uma porção dela reescalada de maneira apropriada possui as mesmas propriedades estatísticas que a interface como um todo. Por isso, em fenômenos naturais estamos interessados em auto-similaridade no sentido estatístico.

A auto-afinidade é uma simetria muito útil no estudo de interfaces. Se consideramos que $h(\vec{x}, t)$ é a altura de cada ponto de uma interface em um instante de tempo, uma transformação de escala anisotrópica geral será

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' \equiv b\vec{x}, \quad h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h \quad e \quad t \rightarrow t' \equiv b^z t, \quad (2.5)$$

onde b é um fator de escala arbitrário, os expoentes α e z são relacionados à anisotropia da transformação. Se essa interface for auto-afim, as propriedades estatísticas de h são iguais as de h' . Essa simetria pode ser utilizada em cálculos analíticos, como faremos na seção 2.3.3.

2.2 Escala dinâmica da rugosidade

As diversas interfaces encontradas na natureza são fruto das mais distintas interações fundamentais entre seus constituintes. No entanto, nota-se que sistemas muito

2.2 Escala dinâmica da rugosidade

distintos podem apresentar propriedades estatísticas similares. Esse comportamento universal tipicamente aparece nas propriedades de escala da rugosidade. Para definir a rugosidade devemos, primeiramente, definir a altura média, que em uma rede discreta com L sítios possui a forma

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h_i(t), \quad (2.6)$$

onde h_i é a altura do i -ésimo sítio da rede e a soma é feita sobre todos os sítios da superfície. A rugosidade da interface, que caracteriza as flutuações em torno da média, é simplesmente o desvio quadrático médio das alturas, dado por

$$W(L, t) = \sqrt{\left\langle \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L (h_i(t) - \bar{h}(t))^2 \right\rangle}. \quad (2.7)$$

onde $\langle \dots \rangle$ significa uma média sobre diferentes amostras.

Quando estudamos problemas em geometria plana, normalmente iniciamos com um substrato liso e, portanto, com rugosidade nula. À medida que as partículas vão sendo adicionadas ao substrato, mais alturas são acessíveis ao sistema, aumentando as flutuações em torno da média, implicando num aumento da rugosidade. Independente das peculiaridades de cada sistema, contanto que as partículas depositadas influenciem na deposição em sítios vizinhos, a rugosidade evolui qualitativamente como na figura 2.4. Nesse gráfico podemos ver que a rugosidade apresenta dois regimes característicos. Inicialmente ela cresce como uma lei de potência e depois há um *crossover* para um regime de saturação, onde passa a flutuar em torno de um valor médio. Esta dinâmica inicial é conhecida como regime de crescimento, e nela a rugosidade segue a forma

$$W(L, t) \sim t^\beta \quad \text{para } t \ll t_x, \quad (2.8)$$

onde β é o expoente relacionado a dinâmica da rugosidade, conhecido como expoente de crescimento, e t_x é o tempo de *crossover* entre os dois regimes. Normalmente a unidade de tempo é definida tal que em $\Delta t = 1$ tentamos depositar uma monocamada de partículas.

2.2 Escala dinâmica da rugosidade

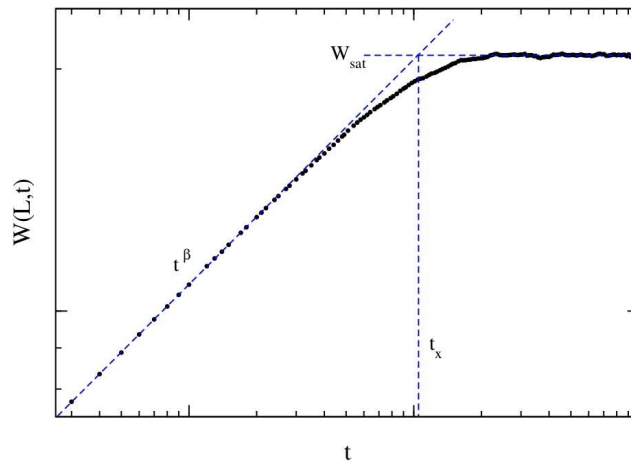


Figura 2.4: Comportamento típico da rugosidade como função do tempo. As linhas tracejadas ilustram o método comumente utilizado para estimar o tempo de saturação t_x .

Após esse regime de crescimento, temos um intervalo de tempo relacionado ao transiente para o regime de saturação. Nesse novo regime a rugosidade flutua em torno de um valor fixo, e assim temos

$$W(L, t) = W_{sat}(L) \quad \text{para } t \gg t_x. \quad (2.9)$$

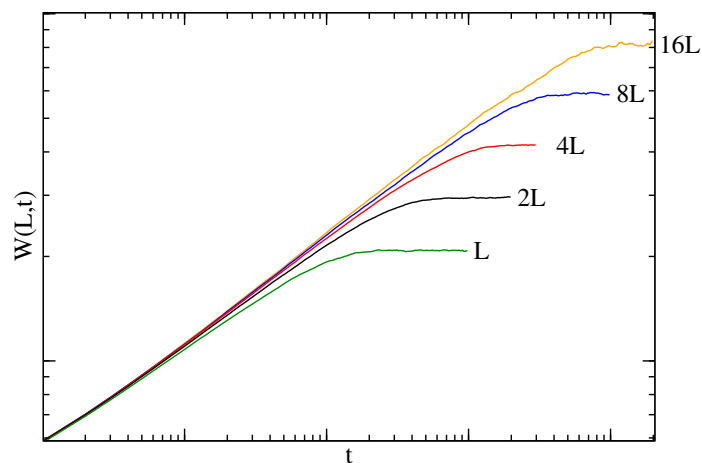


Figura 2.5: Comportamento típico da rugosidade para sistemas de diferentes tamanhos.

Como mostra a figura 2.5, esse valor de saturação depende do tamanho do

2.2 Escala dinâmica da rugosidade

sistema. Se traçamos um gráfico com os diferentes valores de W_{sat} em função do tamanho do sistema (figura 2.6(a)), notamos que o valor de saturação cresce como uma lei de potência, assim temos

$$W_{sat}(L) \sim L^\alpha, \quad (2.10)$$

onde α é conhecido como expoente de rugosidade.

Assim como o valor de saturação cresce com o tamanho do sistema, o tempo de saturação t_x também aumenta. O método normalmente utilizado para estimar esse valor foi ilustrado na figura 2.4. Basicamente é o tempo que o prolongamento do regime de crescimento gastaria para alcançar o valor de saturação. Analisando a dependência de t_x com L , figura 2.6(b), obtemos

$$t_x \sim L^z, \quad (2.11)$$

onde z é conhecido como expoente dinâmico.

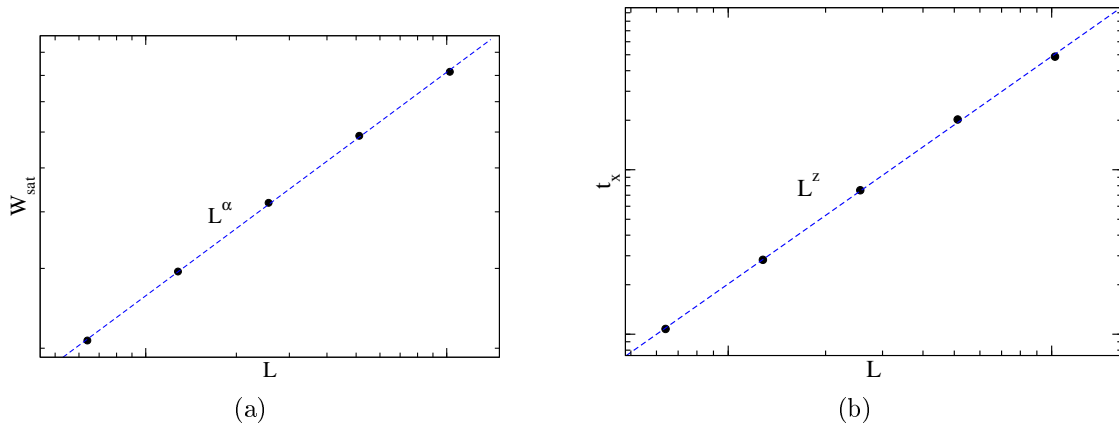


Figura 2.6: Comportamentos típicos:(a) da rugosidade de saturação em função do tamanho do sistema, (b) do tempo de saturação em função do tamanho do sistema.

A saturação da rugosidade é consequência de um processo mais sutil que ocorre na interface durante o crescimento. Esse pode ser explicitado notando que quando o crescimento de um sítio depende de alguma forma dos seus vizinhos, existe uma correlação entre as alturas da interface. A medida que as partículas vão sendo adi-

2.3 Classes de universalidade na dinâmica de interfaces

cionadas, correlações se propagam pela superfície. Assim, existe um comprimento de correlação lateral ($\xi_{||}$) dentro do qual dois sítios podem ser ditos correlacionados. Esse comprimento cresce de acordo com

$$\xi_{||} \sim t^{1/z}. \quad (2.12)$$

Quando $\xi_{||} \approx L$, o sistema se encontra completamente correlacionado. Assim, a dinâmica de cada sítio passa a estar relacionada com todos os demais, impedindo que as flutuações em torno da média aumentem, por isso a rugosidade para de crescer.

Podemos achar uma relação entre os expoentes α , β e z através de um raciocínio bem simples. Se acompanharmos a evolução da rugosidade, se nos aproximarmos de t_x pelo regime de crescimento temos $W(L, t) \sim t_x^\beta$, já pelo de saturação temos $W(L, t) = W_{sat} \sim L^\alpha$. Dessa forma, no *crossover* teremos $t_x^\beta \sim L^\alpha$, assim da eq. 2.11 concluímos que $L^{\beta z} \sim L^\alpha$, logo

$$z\beta = \alpha. \quad (2.13)$$

2.3 Classes de universalidade na dinâmica de interfaces

Sistemas nos quais a dinâmica envolve a evolução de interfaces são onipresentes na natureza. Esse tipo de fenômeno pode ser encontrado nas mais distintas escalas. Desde sistemas muito grandes, como processos de erosão de terrenos e montanhas, até sistemas muito pequenos, como deposição de filmes finos. Dessa forma, é evidente que esses sistemas são produzidos pelos mais complexos e distintos mecanismos fundamentais. No entanto, como já dito, apesar das grandes diferenças entre esses sistemas, nota-se que sistemas muito distintos podem apresentar propriedades estatísticas similares. Essas semelhanças sugerem que podemos agrupar os sistemas em classes de universalidade. A definição mais comum de classe de universalidade diz que sistemas que possuem o mesmo conjunto de expoentes críticos pertencem a mesma classe de universalidade. No entanto, as semelhanças não param nesses expoentes, dentro de uma

2.3 Classes de universalidade na dinâmica de interfaces

mesma classe encontraremos universalidade em diversas propriedades, por exemplo, nas distribuições de alturas [11,44], distribuições de extremos [45,46] e distribuição de rugosidade [47,48]. Além disso, essas semelhanças também sugerem que as dinâmicas de sistemas pertencentes a mesma classe de universalidade podem ser modeladas por uma mesma equação estocástica. Cada equação, assim como as classes de universalidade, possui os principais mecanismos e simetrias envolvidas no tipo de interface as quais ela está relacionada.

Nesta seção, vamos discutir três classes de universalidade: deposição aleatória (RD), Edwards–Wilkinson (EW) e Kardar–Parisi–Zhang (KPZ). Apesar de nossos principais resultados estarem relacionados a classe KPZ, é útil discutir essas outras classes para introduzir de forma gradual alguns dos mecanismos envolvidos na dinâmica de interfaces. Discutiremos as distribuições de alturas separadamente na próxima seção, onde utilizaremos de diversos conceitos introduzidos aqui.

2.3.1 Equações estocásticas e princípios de simetria

Equações estocásticas são formulações matemáticas que aparecem em diversos problemas da física e áreas afins. No contexto de superfícies, essas formulações são propostas para descrever a dinâmica de interfaces. Esta modelagem é feita no limite contínuo, para tamanhos de sistema e tempos muito grandes. Normalmente utiliza-se equações do tipo Langevin com ruído aditivo nessa modelagem. De maneira geral, esse tipo de equação é dada por

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = G(h(\vec{x}, t), \vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.14)$$

onde $h(\vec{x}, t)$ é um processo estocástico, que no nosso caso são as alturas da interface, $G(h(\vec{x}, t), \vec{x}, t)$ é uma função que representa todos os termos determinísticos da equação e $\eta(\vec{x}, t)$ é um ruído branco responsável pela aleatoriedade no sistema, sendo que

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad (2.15)$$

2.3 Classes de universalidade na dinâmica de interfaces

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t'), \quad (2.16)$$

onde D é uma constante que mede a intensidade do ruído, δ é a função delta de Dirac e d é a dimensão do substrato. A primeira relação nos diz que esse ruído não altera a altura média, e a segunda que ele é totalmente descorrelacionado.

Voltando a equação 2.14, o termo $G(h(\vec{x}, t), \vec{x}, t)$ determina as simetrias e as leis de conservação que o processo de crescimento irá satisfazer. Assim, a construção da equação estocástica é feita representando em forma diferencial o tipo de processo de relaxação que é relevante na superfície. As simetrias que normalmente são satisfeitas pelas interfaces são:

1. Invariância sobre translações espaço-temporais ($\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \vec{a}, t \rightarrow t + b$), ou seja, a interface seria independente da escolha da origem (\vec{x}_0, t_0) do nosso sistema de coordenadas. Essa simetria impede que G seja função explícita de \vec{x} ou t .
2. Simetria sobre translação na direção de crescimento. Análogo ao caso anterior, a interface seria independente da escolha da origem na medida da altura. Essa simetria impede que G dependa explicitamente de h .
3. Simetria sobre rotação em torno da direção de crescimento. Uma rotação específica seria tal que $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$, ela faria com que a derivada $\partial h / \partial(-x) = -\partial h / \partial x$. Assim nesse sistema girado a equação teria sinais diferentes. Dessa forma, a simetria sobre rotações exige que G dependa de derivadas de ordem par de h ou derivadas de ordem ímpar elevadas a uma potência par, por exemplo, $\nabla^n h$ ou $(\nabla h)^n$ com n par.
4. Invariância das propriedades estatísticas sobre transformações de escala anisotrópicas, como as da página 9. Essa simetria exige que as estruturas formadas sejam auto-afins.

Sobre as leis de conservação, dependendo do sistema, as partículas que chegam ao agregado podem se organizar de forma que a evolução da altura média seja maior que o fluxo médio de partículas, ou menor caso algumas das partículas não se agreguem

2.3 Classes de universalidade na dinâmica de interfaces

à interface. Na forma matemática, um sistema conservativo é tal que

$$\frac{1}{L^d} \int_0^{L_1} \dots \int_0^{L_d} G d^d \vec{x} = F, \quad (2.17)$$

onde F é o fluxo médio de partículas e a integração é feita sobre as d dimensões do sistema. Um sistema que satisfaça essa equação possuirá $\partial \langle h \rangle / \partial t = F$, ou seja, a cada unidade de tempo a altura média aumenta de um valor igual ao fluxo médio de partículas.

2.3.2 Deposição aleatória (RD)

Esta classe de universalidade é o modelo mais simples que podemos imaginar. Nela temos interfaces que são completamente descorrelacionadas, ou seja, o crescimento em um local é independente de sua vizinhança. Dessa forma, como dissemos na página 12, as rugosidades das interfaces dessa classe de universalidade nunca saturam, sendo assim não teremos os expoentes α e z bem definidos.

Um modelo discreto que exemplifica essa classe seria o seguinte: em uma rede discreta com L sítios, escolhemos aleatoriamente um desses sítios e adicionamos uma partícula a ele. Como o crescimento de um sítio é completamente independente de seus vizinhos, fica evidente que não haverá propagação de correlações na superfície, por isso as rugosidades das interfaces produzidas nunca saturam.

Pensando na equação estocástica relacionada a essa classe de universalidade, se exigimos que a equação satisfaça as simetrias da seção anterior, $G(h(\vec{x}, t), \vec{x}, t)$ fica restrito a derivadas espaciais de ordem par de h ou derivadas de ordem ímpar elevadas a uma potência par. No entanto, colocar derivadas espaciais no termo G seria dizer que, de alguma forma, o crescimento em um ponto da interface depende da sua vizinhança. Dessa forma, a equação para essa classe é

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

lembrando que F é o número médio de partículas por sítio que chegam ao substrato

2.3 Classes de universalidade na dinâmica de interfaces

em uma unidade de tempo.

Por causa da simplicidade dessa equação, podemos facilmente calcular o expoente de crescimento. Integrando 2.18 no tempo, teremos

$$h(\vec{x}, t) = Ft + \int_0^t \eta(\vec{x}, t') dt', \quad (2.19)$$

tirando a média espacial

$$\langle h(\vec{x}, t) \rangle = Ft + \int_0^t \langle \eta(\vec{x}, t') \rangle dt', \quad (2.20)$$

usando a eq.2.15 resulta em

$$\langle h(\vec{x}, t) \rangle = Ft. \quad (2.21)$$

Agora, elevando a eq.2.19 ao quadrado e usando as equações 2.15 e 2.16 temos

$$\langle h^2(\vec{x}, t) \rangle = F^2 t^2 + 2Dt. \quad (2.22)$$

A rugosidade será dada por

$$W = \sqrt{\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2} = \sqrt{2Dt}. \quad (2.23)$$

Assim o expoente de crescimento será $\beta = 1/2$.

2.3.3 A classe de Edwards–Wilkinson(EW)

Essa classe foi proposta por Edwards e Wilkinson [49], incluindo um termo relacionado a tensão superficial da interface na equação 2.18. Esse termo tende a redistribuir o material na interface de forma a suavizá-la. Primeiro vamos obter a equação estocástica através de argumentos de simetria e depois analisaremos em detalhe o efeito dessa tensão superficial.

A equação de Edwards-Wilkinson (EW) pode ser obtida exigindo mais uma simetria além das discutidas na página 15. Adicionando a invariância sobre reflexão em torno da altura média, ou seja, simetria sob a transformação $h \rightarrow -h$ no referencial

2.3 Classes de universalidade na dinâmica de interfaces

que se desloca junto à altura média. Essa transformação leva $\partial h/\partial t \rightarrow -\partial h/\partial t$, por isso precisamos que $G \rightarrow -G$, que proíbe a existência de termos $(\nabla h)^n$ com n par, sobrando apenas $\nabla^n h$ com n ímpar. A equação mais simples que irá satisfazer essas condições será

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.24)$$

onde ν é um parâmetro da equação, ou seja, varia de acordo com as individualidades de cada sistema. O fluxo médio de partículas F não aparece pois estamos no referencial da altura média.

Como já foi adiantado, o termo $\nu \nabla^2 h$ representa a tensão superficial na interface. Esse termo redistribui o material na superfície de maneira conservativa, não modificando o valor da altura média. A intensidade desse efeito está relacionada ao parâmetro ν , ou seja, esse parâmetro relaciona a equação estocástica a cada sistema em particular. Na figura 2.7 apresentamos um exemplo unidimensional do efeito desse termo sobre um vale da interface. Note como ele tende a suavizar a interface, diminuindo a profundidade e aumentando a largura do vale.

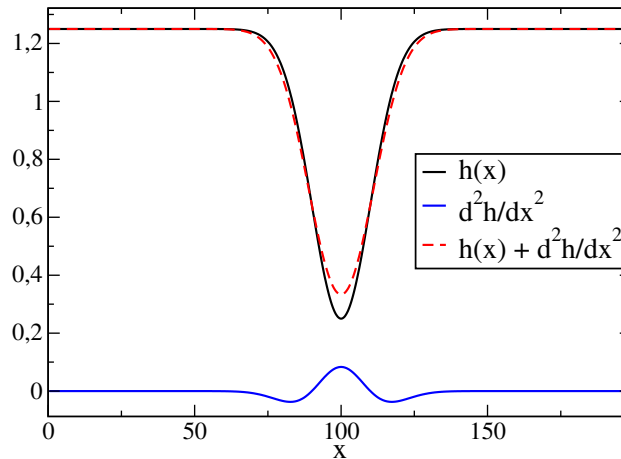


Figura 2.7: Efeito do termo $\nu \nabla^2 h$ sobre um vale em uma interface unidimensional. Utilizamos $\nu = 8$ nessa ilustração.

Por causa da simplicidade da equação EW, os expoentes críticos podem ser calculados facilmente. Isso pode ser feito resolvendo diretamente a equação 2.24 via uma transformada de Fourier no espaço e no tempo, como feito na referência [6]. No entanto,

2.3 Classes de universalidade na dinâmica de interfaces

é muito mais simples utilizar o fato de que as interfaces produzidas pela equação EW são invariantes sobre uma transformação de escala anisotrópica apropriada, ou seja, são estruturas auto-afins. Dessa forma, fazemos

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' \equiv b\vec{x}, \quad h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h \quad e \quad t \rightarrow t' \equiv b^z t, \quad (2.25)$$

onde b é um fator de escala.

O efeito dessas transformações de escala sobre o ruído η pode ser identificado através da definição 2.16, lembrando que $\delta^d(a\vec{x}) = a^{-d}\delta(\vec{x})$, assim teremos

$$\langle \eta(b\vec{x}, b^z t) \eta(b\vec{x}', b^z t') \rangle = 2Db^{-(d+z)} \delta^d(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t'). \quad (2.26)$$

Dessa forma, depois das transformações 2.25 a equação 2.24 se torna

$$b^{\alpha-z} \frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu b^{\alpha-2} \nabla^2 h + b^{-(d+z)/2} \eta(\vec{x}, t), \quad (2.27)$$

que dividindo por $b^{\alpha-z}$ resulta em

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu b^{z-2} \nabla^2 h + b^{-(d-z)/2-\alpha} \eta(\vec{x}, t). \quad (2.28)$$

A auto-afinidade exige que os resultados dessa equação sejam os mesmos que os da 2.24, assim os expoentes de b devem se anular. Se usarmos também a relação entre os expoentes 2.13 vamos obter

$$z = 2, \quad \alpha = \frac{2-d}{2} \quad e \quad \beta = \frac{2-d}{4} \quad (2.29)$$

Esses são os expoentes de escala relacionados a classe EW. Note que eles dependem do número de dimensões d da interface.

2.3.4 A classe de Kardar–Parisi–Zhang(KPZ)

O modelo contínuo, ou equação estocástica, associado a esta classe foi proposto por Kardar, Parisi e Zhang [34]. Nesse trabalho, eles adicionaram um termo à equação EW 2.24 que é responsável por um crescimento localmente normal à interface. Esse termo modela, por exemplo, sistemas nos quais as partículas tendem a se agregar no ponto onde elas tocam a interface.

A equação mais simples que satisfaz as simetrias da página 15, ou seja, quebra a simetria ($h \rightarrow -h$) da classe EW, é dada por

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.30)$$

onde λ é um parâmetro relacionado a intensidade do efeito causado pelo termo não-linear. Como já foi dito, o termo $\frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2$ é responsável por um crescimento localmente normal à interface, assim, aparece uma componente lateral no crescimento da superfície. Esse termo causa um crescimento não conservativo, relacionado a um excesso ou redução, dependendo do sinal de λ , na taxa de aumento da interface. A contribuição desse termo é dita não conservativa por modificar a dinâmica da altura média. Na figura 2.8 mostramos o efeito do termo não-linear sobre um vale da interface. Note como fica evidente a componente lateral que aparece no crescimento, como o vale fica mais estreito com as descidas mais íngremes.

Por causa da não-linearidade da equação KPZ, ela não possui solução analítica conhecida. Além disso, os expoentes não podem ser calculados através de transformações de escala, como foi feito para EW. Isso porque os parâmetros ν , λ e D não renormalizam de forma independente, ficando acoplados após a transformação, o que leva a três equações inconsistentes para dois dos expoentes. No entanto, para uma dimensão, os expoentes podem ser obtidos através do grupo de renormalização, como é feito na referência [34]. Esse tratamento leva a $\alpha = 1/2$, $\beta = 1/3$ e $z = 3/2$. Resultados numéricos apontam que para duas dimensões os expoentes são: $\alpha \approx 0,38$, $\beta \approx 0,24$ e $z \approx 1,67$ [6,26,28].

2.4 Distribuições de alturas

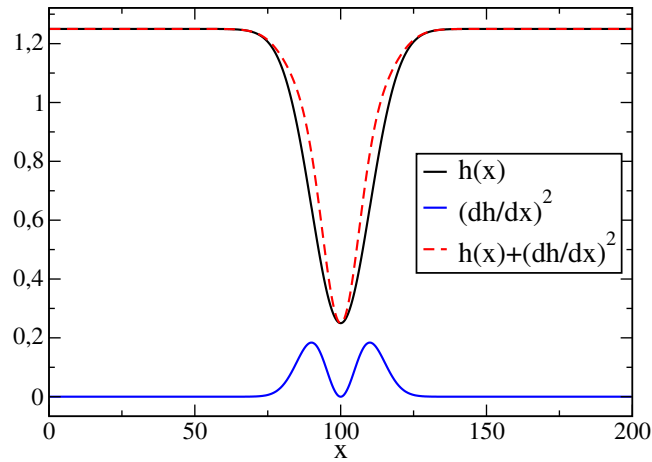


Figura 2.8: Efeito do termo $\frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2$ sobre um vale de uma interface unidimensional. Utilizamos $\lambda = 100$ nessa ilustração.

2.4 Distribuições de alturas

Quando definimos as classes de universalidade, foi dito que interfaces cujas dinâmicas são regidas pelos mesmos expoentes críticos pertencem à mesma classe. No entanto, as leis de escala da rugosidade não são as únicas propriedades estatísticas universais no crescimento de interfaces. Dentre outras, as distribuições de altura (HD's)–(*height distribution*) das interfaces também apresentam universalidade e, assim, podem ser utilizadas para classificá-las.

Como o próprio nome sugere, a HD é uma densidade de probabilidade, ou seja, é uma função $p(h)$ onde $p(h)dh$ é a probabilidade de encontrarmos uma altura entre h e $h + dh$. Para deixar mais claro o que se espera dessas distribuições, vamos analisá-las para as três classes que introduzimos na seção passada.

Iniciando pela classe RD, consideramos um modelo discreto onde temos uma rede de L sítios, cuja interface é gerada sorteando sítios aleatoriamente e adicionando uma unidade a sua altura. Analisando uma coluna da interface, a probabilidade da altura ser h é igual a probabilidade do sítio correspondente ser sorteado h vezes dentro do número total N de partículas depositadas. Sendo $1/L$ a probabilidade do sítio de interesse ser sorteado e $1 - 1/L$ a probabilidade dele não ser, podemos notar que $p(h)$

2.4 Distribuições de alturas

será uma distribuição binomial, logo

$$p(h) = \frac{N!}{h!(N-h)!} \left(\frac{1}{L}\right)^h \left(\frac{L-1}{L}\right)^{N-h} \quad (2.31)$$

No limite em que $N \rightarrow \infty$, que é basicamente $t \rightarrow \infty$, podemos mostrar que essa distribuição tende para uma gaussiana. Essa demonstração é feita no apêndice 1. Seguindo os cálculos desse apêndice temos que essa distribuição para a classe RD é dada por

$$p_{RD}(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left(-\frac{(h-t)^2}{2t}\right) \quad . \quad (2.32)$$

Independentemente da classe de universalidade, a amplitude da variância e a taxa de aumento da altura média dependem dos parâmetros das equações estocásticas e, assim, assumem diferentes valores para cada sistema em particular. Dessa forma, para comparar distribuições obtidas em tempos diferentes, ou sistemas distintos, é mais interessante reescalá-las para média nula e variância unitária. Essa transformação irá colapsar as distribuições de diferentes sistemas (pertencentes a uma mesma classe) em uma curva universal, que é uma característica intrínseca da classe de universalidade. Dessa forma, é mais interessante estudar as HD's reescaladas pela seguinte transformação:

$$p(h) \longrightarrow p'(h) \equiv Wp(h) \quad e \quad h \rightarrow h' \equiv \frac{h - \langle h \rangle}{w} \quad (2.33)$$

O cálculo para a classe EW pode ser encontrado na referência [39]. E a HD também é gaussiana. Inicialmente a evolução da distribuição é análoga à da classe RD, no entanto, quando a rugosidade da interface satura, a variância da distribuição para de aumentar. Essa HD continuará a se deslocar por causa da evolução da altura média, mas com largura fixa após a saturação.

Antes de discutirmos as HD's da classe KPZ, vamos apresentar o modelo PNG (*Polynuclear Growth model*), porque ele foi importante no cálculos exato dessas distribuições. Uma das idealizações iniciais desse modelo pode ser encontrada na referência [40], e seu algoritmo para simulações de Monte Carlo pode ser encontrado na referência [41]. Nesse modelo, ilhas são nucleadas a uma taxa J , por sítio da rede, em

2.4 Distribuições de alturas

posições aleatórias. As ilhas começam com raio nulo e se expandem com uma velocidade radial v . Tanto a taxa de crescimento quanto a de nucleação são independentes do tempo e da posição na interface. Quando duas ilhas se encontram elas coalescem, formando uma única ilha maior. Na figura 2.9, ilustramos a forma de crescimento desse modelo em uma dimensão.

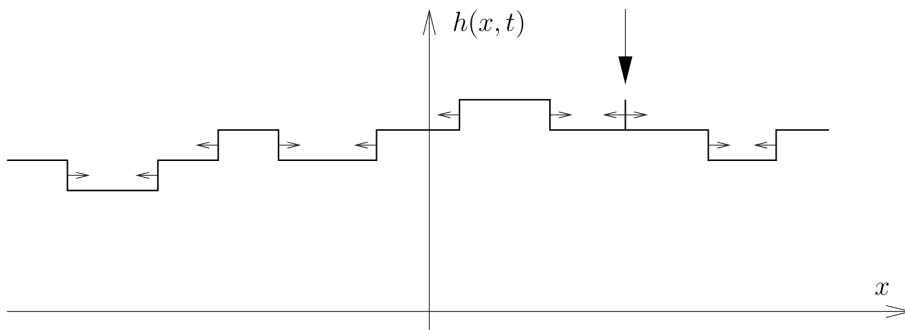


Figura 2.9: Ilustração da regra de crescimento do modelo PNG. A seta vertical indica a posição de uma ilha recém-nucleada. Figura extraída de [42].

É possível utilizar o modelo PNG para produzir interfaces curvas. Para isso basta iniciar o crescimento com uma nucleação na origem e só fazer novas nucleações sobre a região compreendida por essa primeira ilha. Interfaces geradas dessa maneira tem a forma de uma gota. Um exemplo de é apresentado na figura 2.10.

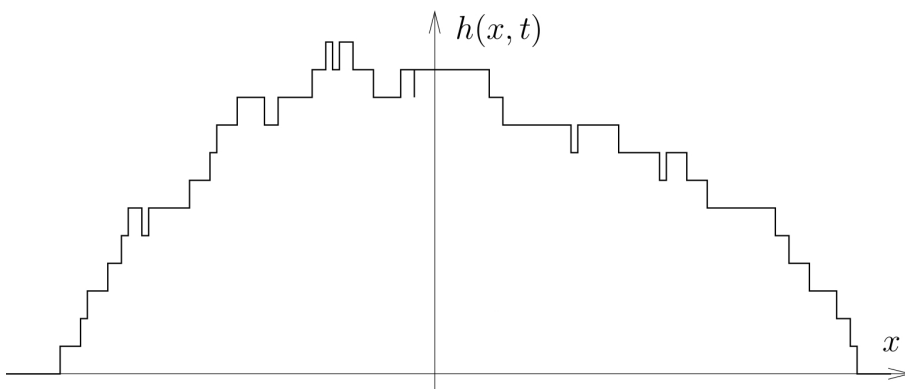


Figura 2.10: Superfície produzida pelo modelo PNG na forma de gota. Figura extraída de [42].

Para a classe KPZ, por causa da não-linearidade da equação estocástica, obter

2.4 Distribuições de alturas

HD é uma tarefa muito complexa. Um dos primeiros passos nesse sentido foi dado por Johansson [43], que calculou analiticamente a distribuição assintótica de um modelo similar ao Single-Step (apresentado na seção 4.2.3). O autor mostrou que essa distribuição converge para a distribuição Tracy-Widom do maior auto valor do ensemble gaussiano unitário (GUE–*Gaussian unitary ensemble*), que é uma distribuição da teoria de matrizes aleatórias. Pouco depois, Prähofer e Spohn [11,44] conseguiram calcular a distribuição do modelo PNG na forma plana (fig. 2.9) e na de gota (fig. 2.10). Eles mostraram que, ao contrário do expoente de crescimento, que é independente da curvatura, a HD da classe KPZ depende da geometria da interface. No caso plano, essa HD está relacionada ao ensemble gaussiano ortogonal (GOE–*Gaussian orthogonal ensemble*), e no caso curvo ao ensemble gaussiano unitário (GUE). Assim, a classe de universalidade KPZ se divide em subclasses com propriedades dependentes da geometria da interface.

Podemos escrever as alturas de uma superfície da classe KPZ como

$$h(x, t) = v_\infty t + \text{sig}(\lambda)(\Gamma t)^\beta \chi \quad , \quad (2.34)$$

onde $\text{sig}(\lambda) = +1$ ou -1 nos dá o sinal de λ (na eq. 2.30), v_∞ e Γ são parâmetros não-universais (dependentes do modelo), enquanto χ é uma variável aleatória dada por uma distribuição universal e β é o expoente de crescimento. O primeiro termo do lado direito representa uma parcela determinística dominante no aumento da altura média. Já o segundo é um termo aleatório relacionado às flutuações presentes na interface. Neste termo, χ é dada pela GOE ou GUE, dependendo da geometria, e Γ é uma constante relacionada à amplitude dessas flutuações.

No caso plano unidimensional, após a saturação da rugosidade a HD da classe KPZ sofre um *crossover* de GOE para uma gaussiana [6]. Assim, a HD passa a ser simétrica após a saturação, ou seja, a interface passa a ter simetria sob reflexão em torno da altura média, como na classe EW.

Esses resultados analíticos sobre a divisão da classe KPZ em plano e curvo foram confirmados experimentalmente na referência [50,51]. Isso foi feito utilizando eletro

2.4 Distribuições de alturas

convecção de cristal líquido nemático. Confinando esse cristal líquido em uma região estreita entre dois planos e aplicando uma tensão alternada no sistema, ele apresenta duas fases turbulentas, sendo uma metaestável e a outra estável. O experimento iniciava com o cristal líquido na fase metaestável e, então, era aplicada uma perturbação que o fazia transitar para a fase estável. Como esses estados espalham luz de forma diferente, é possível registrar a evolução da interface que separa as duas fases. Mais detalhes sobre esse experimento podem ser encontrados na referência [52]. A interface obtida é curva se a perturbação for aplicada a um único ponto, e plana caso aplicada em uma linha. Além de encontrarem os expoentes da classe KPZ, os autores mostram que nesse sistema as HD's são consistentes com a equação 2.34. Na figura 2.11(a) mostramos a comparação dos resultados experimentais com os analíticos.

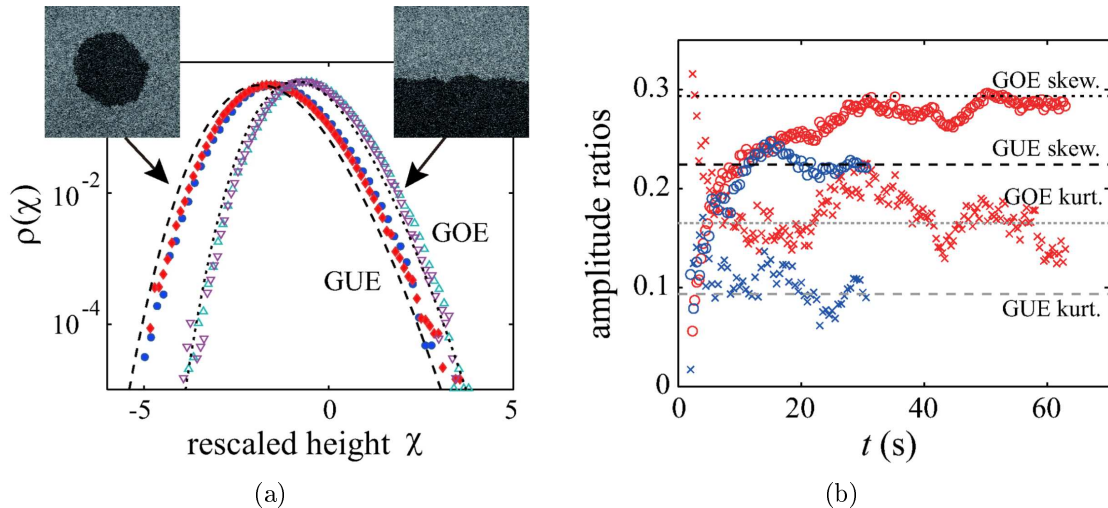


Figura 2.11: (a) Distribuição de alturas da eletro-convecção de cristais líquidos comparadas com as previsões teóricas. A curva tracejada é a GUE e a pontilhada a GOE. Os símbolos preenchidos azuis e vermelhos foram obtidos para interfaces circulares com tempos $t = 10$ s e $t = 30$ s respectivamente. Já os símbolos não preenchidos azuis e púrpuros foram obtidos para crescimentos planos com tempos $t = 20$ s e $t = 60$ s respectivamente. Figura extraída de [51]. (b) Gráfico da *skewness* (círculos) e curtose (cruzes) do crescimento curvo (azul) e plano (vermelho). O Gráfico mostra que a diferença entre as distribuições em (a) é um deslocamento na média, pois a *skewness* e a curtose convergem para os resultados analíticos de [11].

Apesar da *skewness* e da curtose das distribuições em 2.11(a) concordarem com a previsão teórica, como podemos ver na figura 2.11(b), podemos observar que os resultados experimentais se encontram ligeiramente deslocados em relação às curvas

2.4 Distribuições de alturas

teóricas. Como mostrado na referência [51], essa diferença no valor médio decai com $t^{-1/3}$. Esse deslocamento também foi encontrado em simulações [53] e na solução da equação KPZ [54]. Isso sugere o acréscimo de termos relacionados a correções na eq. 2.34. Alves et al. [35] propuseram a equação:

$$h(x, t) = v_\infty t + \text{sig}(\lambda)(\Gamma t)^\beta \chi + \eta + \zeta t^{-\gamma} + \dots \quad , \quad (2.35)$$

onde η e ζ podem ser variáveis aleatórias ou determinísticas. O η aparece devido a um deslocamento na média da distribuição, ou seja, na média das alturas. Vale ressaltar que esse η não é o ruído branco que aparece nas equações estocásticas da seção 2.3. O segundo termo acrescentado está relacionado ao tempo de convergência dos momentos da distribuição, sem alterar os seus valores assintóticos. As reticências no final da equação representam outras correções que convergem para zero mais rápido que $t^{-\gamma}$.

Todos esses resultados relacionados às HD's da classe KPZ foram obtidos para o caso unidimensional. Em duas dimensões não existem resultados analíticos relacionados às distribuições de alturas. No entanto, resultados numéricos [26–28] sugerem que uma equação similar à 2.34 funciona bem em sistemas bidimensionais. Nesse caso, os parâmetros v_∞ e Γ são diferentes do caso unidimensional. Além disso, a distribuição análoga ao χ da 2.34 também é diferente das distribuições Tracy-Widom. No entanto, assim como em uma dimensão, χ depende da geometria da interface.

É difícil quantificar as diferenças entre distribuições analisando apenas a curva de $p(h)$ por h . Por isso é interessante estudar as distribuições através de seus cumulantes. O momento de ordem n de uma distribuição de alturas $p(h)$ é dado por

$$\langle h^n \rangle = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h_i^n \quad . \quad (2.36)$$

Os cumulantes da distribuição podem ser escritos como combinações lineares dos mo-

2.4 Distribuições de alturas

mentos [55]. Até o cumulante de quarta ordem tem-se:

$$\begin{aligned}
 \langle h \rangle_c &= \langle h \rangle ; \\
 \langle h^2 \rangle_c &= \langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 ; \\
 \langle h^3 \rangle_c &= \langle h^3 \rangle - 3\langle h^2 \rangle \langle h \rangle + 2\langle h \rangle^3 ; \\
 \langle h^4 \rangle_c &= \langle h^4 \rangle - 4\langle h^3 \rangle \langle h \rangle - 3\langle h^2 \rangle^2 + 12\langle h^2 \rangle \langle h \rangle^2 - 6\langle h \rangle^4 .
 \end{aligned}
 \tag{2.37}$$

É possível definir diversas razões adimensionais desses cumulantes. Três delas são especialmente interessantes: a curtose K , o coeficiente de assimetria S , ou *skewness*, e uma razão entre os dois primeiros cumulantes R . Essas grandezas são definidas por

$$R = \frac{\langle h \rangle_c}{\langle h^2 \rangle_c^{1/2}} \quad , \quad S = \frac{\langle h^3 \rangle_c}{\langle h^2 \rangle_c^{3/2}} \quad \text{e} \quad K = \frac{\langle h^4 \rangle_c}{\langle h^2 \rangle_c^2} .
 \tag{2.38}$$

Em distribuições simétricas, $S = 0$, a média é igual a moda, onde este último é o valor mais provável da distribuição. Nos casos em que $S > 0$, a moda é menor que a média, e a cauda do lado direito tende a zero mais devagar que a do lado esquerdo. Quando $S < 0$ acontece o contrário. Ilustramos isso na figura 2.12.

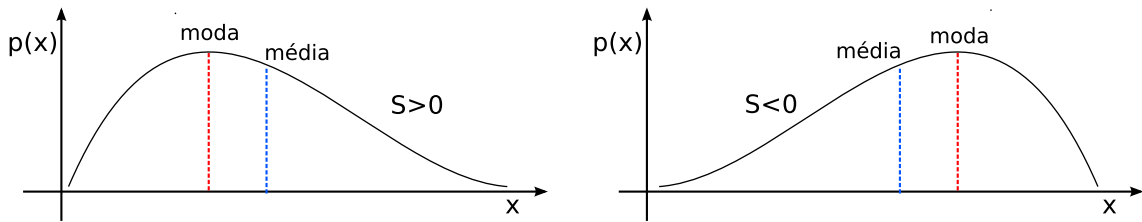


Figura 2.12: *Skewness* de distribuições assimétricas.

A curtose nos dá informação sobre o peso das caudas da distribuição. Como a distribuição é normalizada, quanto maior o peso das caudas mais estreito é o pico. Quando $K > 0$ temos um pico mais estreito e caudas mais pesadas que uma gaussiana, e quando $K < 0$ ocorre o contrário. Isso é ilustrado na figura 2.13.

Os valores dos primeiros cumulantes da distribuição de alturas da classe KPZ em uma e duas dimensões estão resumidos na tabela 2.1. Os valores para uma dimensão

2.4 Distribuições de alturas

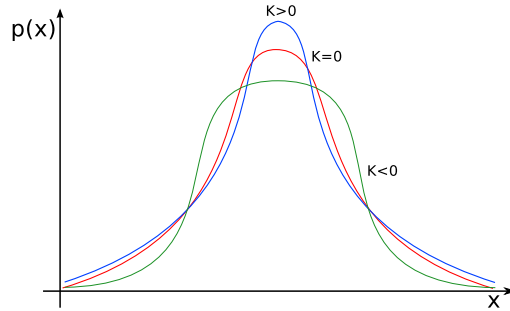


Figura 2.13: Representação qualitativa da curtose.

foram extraídos da referência [11], para duas dimensões tiramos a média dos valores obtidos para os diferentes modelos planos [26] e curvos [27] estudados.

	GOE	GUE	Plano 2d	Curvo 2d
$\langle \chi \rangle_c$	-0,76007	-1,77109	-0,75(6)	-2,3(7)
$\langle \chi^2 \rangle_c$	0,62805	0,81320	0,24(2)	0,33(2)
S	0,2935	0,2241	0,423(8)	0,33(2)
K	0,1652	0,09345	0,34(1)	0,212(9)

Tabela 2.1: Valores das HD's plana e curva da classe KPZ em uma e duas dimensões.

Para finalizar esta seção, vamos ressaltar como a subdivisão da classe KPZ é propícia para nosso trabalho. Como foi dito na introdução, substratos crescentes têm sido utilizados como aproximações de interfaces curvas. Estamos interessados em avaliar se esses domínios crescentes são de fato uma boa aproximação. Como a distribuição de alturas da classe KPZ depende da geometria, nessa classe podemos estudar a HD do domínio crescente para verificar se ela é consistente com a HD curva ou da plana. Com isso, podemos também determinar se a curvatura global é, ou não, o fator principal na produção de diferentes distribuições

Capítulo 3

Interfaces curvas e a aproximação de domínios crescentes

Vamos começar este capítulo discutindo interfaces curvas. Iremos discutir suas principais características e diferenças em relação ao caso plano. Além disso, vamos apontar as dificuldades que aparecem nessa geometria, tanto do ponto de vista analítico quanto computacional. Feito isso, vamos introduzir os domínios crescentes. Iremos apresentar onde eles foram usados como uma aproximação para o caso curvo e resumir alguns dos principais resultados sobre o assunto.

3.1 Crescimento de interfaces curvas

Diversos fenômenos naturais envolvem a dinâmica de interfaces curvas. Crescimentos com essa geometria são especialmente comuns em sistemas biológicos. Exemplos que poderíamos citar seriam: colônias de bactérias, tumores e fungos [4,5,56].

Quando comparamos superfícies curvas com planas notamos duas diferenças principais. A primeira é que em sistemas curvos a interface aumenta com o tempo. No caso unidimensional por exemplo, sempre que o raio do agregado cresce de uma unidade o perímetro da interface cresce de 2π . A outra diferença é a curvatura em si. As derivadas espaciais nas equações estocásticas relacionam a dinâmica de um ponto com a sua vizinhança. Uma curvatura global na interface altera o resultado dessas

3.1 Crescimento de interfaces curvas

derivadas espaciais, o que muda toda a dinâmica do sistema.

Da mesma maneira que é feito em crescimentos planos, podemos classificar interfaces curvas através dos expoentes críticos que regem a dinâmica da rugosidade. Porém, ao contrário dos sistemas planos, nos curvos a rugosidade não satura. Isso porque a interface aumenta com o tempo. Apesar das correlações se propagarem pelo sistema, o crescimento deste impede que toda a superfície fique correlacionada. Assim, existe apenas o regime de crescimento, onde a rugosidade escala com t^β , sendo o expoente β igual ao encontrado no caso plano. Mais detalhes sobre esse assunto serão tratados na seção 3.2.

Estudar analiticamente interfaces curvas geralmente é mais difícil do que o caso plano. Isso porque além das derivadas ficarem mais complexas quando escritas em coordenadas curvilíneas, a própria representação dos efeitos é mais complicada, como à tensão superficial, por exemplo [57]. Para ilustrar esse fato podemos analisar a equação KPZ unidimensional que, de acordo com [29,58] se torna

$$\frac{\partial R}{\partial t} = \frac{\Omega}{R^2} \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} - \frac{\Omega}{R} + \Psi \left[1 + \frac{1}{2R^2} \left(\frac{\partial R}{\partial \theta} \right)^2 \right] + \frac{\eta(\theta, t)}{\sqrt{R}} . \quad (3.1)$$

onde Ω e Ψ são os parâmetros da equação, escritos com outras letras para frisar que não são os mesmos valores do caso plano. Essa equação é claramente mais difícil de trabalhar que a KPZ plana, eq. 2.30, pois o termo relacionado a derivada segunda, que era linear no caso plano, passa a ser não-linear.

Existe uma controvérsia em relação a aplicabilidade da análise de escala, na forma desenvolvida para interfaces planas, em casos curvos. De acordo com [29], a análise de escala é desenvolvida sobre as hipóteses de que a interface pode ser descrita por um referencial euclidiano e que ela não muda de tamanho durante a dinâmica do sistema. Nesse mesmo trabalho, Escudero mostra que para a deposição aleatória (RD) na geometria curva, em uma dimensão a rugosidade em tempos muito longos vai para $W = (\ln(t))^{0.5}$, e que para duas ou mais dimensões a superfície se torna plana porque os ruídos se tornam irrelevantes. Esses resultados causaram uma razoável discussão [30,31], além de contradizer resultados anteriores [32]. Dessa forma, a aplicabilidade

3.1 Crescimento de interfaces curvas

da análise de escala tradicional à crescimentos curvos é um problema em aberto na dinâmica de interfaces.

Interfaces curvas também são mais difíceis de lidar em simulação. Como exemplo, vamos tomar o modelo de Eden [10]. Esse modelo foi proposto para simular o desenvolvimento de uma cultura de células e consiste em, iniciando com uma semente na origem numa rede quadrada bidimensional, crescer o agregado adicionando aleatoriamente partículas a sua vizinhança (borda). O agregado gerado por esse modelo é anisotrópico, devido ao fato de determinadas direções crescerem mais rápido que outras. Esse efeito é um reflexo da anisotropia da própria rede quadrada. Na figura 3.1 apresentamos um exemplo de interface obtida pelo modelo de Eden, onde podemos notar que o perímetro lembra um losango, não uma circunferência. Essa forma anisotrópica traz problemas no estudo da dinâmica da rugosidade [15].

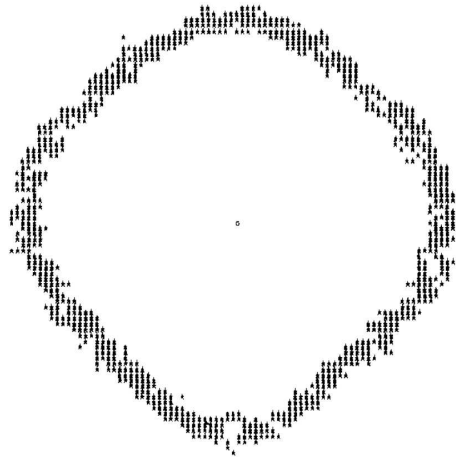


Figura 3.1: Média de nove perímetros obtidos com a versão A do modelo de Eden (ver definição em [14]). Cada perímetro foi crescido até quatro milhões de partículas. Extraída de [14].

A forma anisotrópica é causada pelo crescimento na direção da rede ser mais rápido, pois, por exemplo, quando se sorteia um vizinho da semente, apenas quatro direções de crescimento são possíveis, as diagonais ficam dependentes de um segundo sorteio para crescerem. Essa diferença na velocidade, lembrando da equação 2.34, nos indica que o v_∞ deve variar angularmente. O Γ também deve ser função do ângulo, pois nas direções da rede os raios são maiores que o raio médio e nas diagonais os

3.1 Crescimento de interfaces curvas

raios são menores, onde essa diferença em relação ao círculo de raio médio deve levar a um Γ maior e, entre essas regiões, temos interseções do perímetro do agregado com o círculo, onde o Γ deve ser menor. Dessa forma, quando estudamos a distribuição dos raios do modelo de Eden devemos nos limitar a direções específicas da rede, isso para garantir que estamos estudando pontos com os mesmos valores nos parâmetros não universais. Esse problema prejudica muito a estatística, pois utilizamos poucos pontos por agregado crescido, exigindo um grande número de amostras para obter resultados razoáveis. Além disso, temos um grande desperdício de recursos computacionais, pois a maior parte da interface é simplesmente descartada.

Uma forma de contornar esse problema é implementando o crescimento fora de rede. Ainda considerando o modelo de Eden, podemos utilizar o algoritmo introduzido em [17] como exemplo. Nesse algoritmo as partículas são discos com diâmetro a que são acrescentadas a um plano de crescimento. Iniciando com uma semente, o crescimento é feito sorteando uma partícula do perímetro do agregado e acrescentando uma nova partícula à sua vizinhança, que é colocada tocando a borda da que foi sorteada. A partícula é adicionada em uma direção aleatória, contanto que ela não se sobreponha a outras já existentes. Um exemplo de agregado gerado por esse algoritmo é apresentado na figura 3.2.

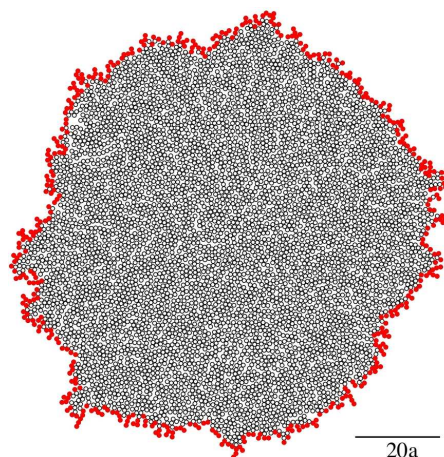


Figura 3.2: Agregado com seis mil partículas gerado com o modelo de Eden fora da rede. O perímetro está realçado em vermelho. Extraída de [59].

3.2 Domínios crescentes

Existem diversas formas de se implementar crescimentos fora da rede, outras opções para Eden podem ser encontradas em [16,18]. No entanto, podemos dizer que, de maneira geral, a simulação de crescimentos fora da rede é mais complicada. Isso porque os algoritmos se tornam cada vez mais complexos a medida que aumentamos as dimensões da interface. Além disso, normalmente esse tipo de crescimento exige mais operações computacionais por partícula a ser acrescentada, fazendo que o crescimento de agregados grandes demandem muito tempo de computação.

Todas essas complicações envolvendo o estudo em geometria curva motivaram uma tentativa de simplificar esse problema. Como dissemos, interfaces curvas possuem perímetros crescentes e curvaturas globais. A aproximação que tem sido proposta consiste em descartar a curvatura e considerar sistemas planos com interfaces que crescem lateralmente. Na próxima seção vamos discutir os resultados já alcançados nesse assunto.

3.2 Domínios crescentes

Os primeiros resultados sobre domínios crescentes podem ser encontrados em [21]. Nesse trabalho, os autores estudaram o modelo de Eden em sistemas planos que crescem lateralmente de acordo com uma lei de potência. O crescimento lateral ocorre de forma determinística fazendo a seguinte comparação:

$$L < L_0 \left(\frac{N}{L} \right)^a \quad (3.2)$$

onde L é o tamanho instantâneo do sistema, L_0 o tamanho inicial, N é o número de partículas depositadas e a define a taxa de crescimento $\dot{L} \sim at^{a-1}$. Se a condição da equação 3.2 for satisfeita, uma coluna do agregado sorteada e duplicada, a nova coluna é adicionada ao lado da original.

A escala da rugosidade desse modelo é afetada pelo valor de a . Se $a > 1/z$, onde z é o expoente dinâmico, existe apenas um regime no qual a rugosidade cresce com t^β , onde β é o expoente de crescimento, ou seja, ela nunca satura. Isso porque a propagação das correlações é mais lenta que o crescimento do sistema e, assim, ele nunca fica

3.2 Domínios crescentes

completamente correlacionado. Por outro lado, se $a < 1/z$, em algum momento haverá um *crossover* desse regime de crescimento usual para outro cuja rugosidade cresce com $a\alpha$, onde α é o expoente da rugosidade. Isso ocorre porque, apesar das correlações já terem se espalhado pela superfície, a rugosidade não satura porque o sistema continua crescendo. Assim, a rugosidade passa a escalar como $W(L, t \rightarrow \infty) \sim L^\alpha$, mas, como $L \sim t^a$, temos $W \sim t^{a\alpha}$. A figura 3.3 mostra o resultado para $a = 0.2$ em diferentes tamanhos iniciais do sistema. A primeira reta é uma lei de potência com expoente $\beta_1 = 0.33$. Após a transição a lei de potência se torna $\beta_2 = 0.1 = a\alpha$.

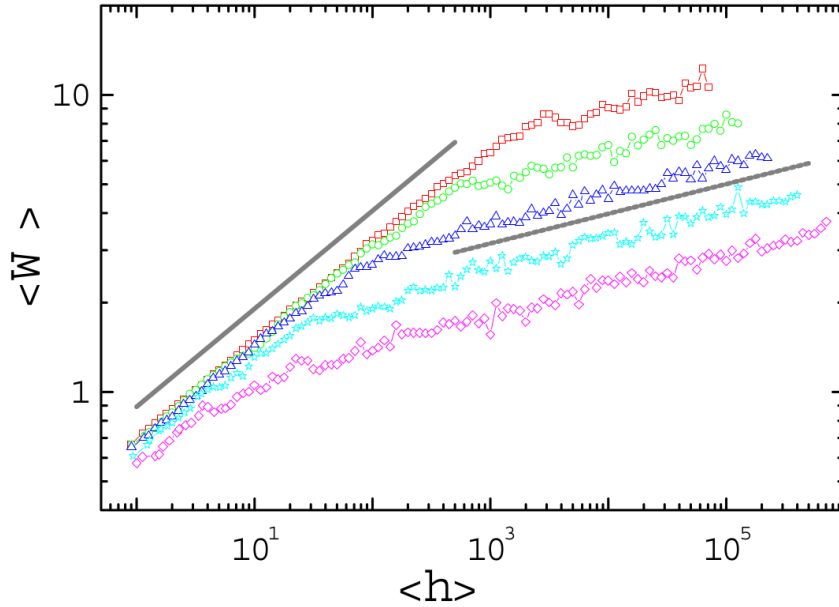


Figura 3.3: Dinâmica da rugosidade para o modelo de [21] com $a = 0.2$ e diferentes tamanhos iniciais. Quadrados são para $L_0 = 128$, círculos $L_0 = 64$, triângulos $L_0 = 32$ e losangos $L_0 = 8$. A reta sólida tem inclinação $\beta_1 = 0.33$ e a reta tracejada $\beta_2 = 0.1$. Extraído de [21].

Posteriormente, partes desses resultados foram obtidos analiticamente por Escudero [19], considerando uma equação geral com um operador difusão de ordem ζ , que para KPZ e EW é de ordem dois. Escudero mostra que se $a > 1/\zeta$ a superfície nunca satura, como foi obtido em [21]. No entanto, para $a < 1/\zeta$, o autor apenas conclui que a interface se torna completamente correlacionada, sem obter a lei de escala presente nos resultados de [21].

3.2 Domínios crescentes

A discussão em relação a aplicabilidade da análise de escala tradicional à interfaces curvas volta à tona com o trabalho de Masoudi et al. [20]. Esses autores fizeram cálculos analíticos para geometria curva em uma dimensão que contradizem os resultados de Escudero, mostrando a validade da análise de escala usual. Para corroborar seus resultados analíticos, eles apresentam também resultados numéricos onde a análise de escala funciona bem. No entanto, as simulações deles não são de sistemas comprovadamente curvos, mas na verdade tratam-se de domínios crescentes. Dessa forma, a princípio, não há relação direta entre seus resultados analíticos e as simulações.

No algoritmo utilizado em [20], foi considerado um substrato plano e modelos discretos já conhecidos, sendo eles os modelos RDSR [37] e RSOS [38], das classes EW e KPZ respectivamente. Em cada unidade de tempo, inicialmente deposita-se um número de partículas igual ao tamanho lateral da rede. Feito isso, a unidade de tempo termina após seis colunas serem adicionadas ao substrato de maneira igualmente espaçada. Para definir o valor dessas alturas a serem adicionadas, a distribuição de alturas da interface é construída, e nela são sorteados os valores das alturas, esse sorteio é refeito se uma altura não satisfaz as restrições do modelo. A inclusão das colunas de forma determinística no final das unidades de tempo é bem distinta de um agregado verdadeiramente curvo, pois assim como seu raio cresce aleatoriamente, o perímetro da interface também deve seguir uma dinâmica estocástica. Além disso, as superfícies produzidas por esse modelo não possuem curvatura global e, assim, esse algoritmo é na verdade um domínio crescente, não necessariamente seguindo a mesma dinâmica que sistemas curvos.

Pelas discussões apresentadas nessa seção, fica evidente que seria interessante estudar mais a fundo modelos de crescimento sobre substratos que aumentam lateralmente e determinar se essa aproximação, de fato, produz interfaces consistentes com o caso curvo.

Capítulo 4

Modelos discretos para o crescimento lateral e vertical da interface

Neste capítulo apresentaremos os modelos utilizados no nosso trabalho. Vamos iniciar discutindo o crescimento lateral da interface, descrevendo o modelo que nós utilizamos para domínios crescentes. Depois apresentaremos as regras de agregação de cada modelo estudado.

4.1 Crescimento lateral do substrato

Nós definimos um modelo com algoritmo parecido aos de [20,21], porém mais estocástico. No nosso modelo, as deposições e o crescimento do substrato acontecem simultaneamente, e de forma aleatória. O algoritmo que definimos é o seguinte:

- Definimos uma taxa de crescimento constante igual a δ , que será o número médio de colunas adicionadas à rede por unidade de tempo.
- Começamos com um substrato de tamanho $L_0 = \delta$, ou seja, definimos o tamanho inicial igual ao módulo da velocidade de crescimento lateral $v_w = \delta$.
- Definimos uma probabilidade para cada evento que pode ocorrer na superfície. Fazemos $P_g = \frac{L}{L+\delta}$ ser a probabilidade de se depositar uma partícula e $P_w = \frac{\delta}{L+\delta}$ a do substrato crescer lateralmente.

4.1 Crescimento lateral do substrato

- O crescimento lateral é feito duplicando uma coluna escolhida aleatoriamente. A nova coluna é adicionada a direita da sorteada.
- A cada evento o tempo é incrementado de $\Delta t = \frac{1}{L+\delta}$. Assim, em cada unidade de tempo, é depositado, em média, um número de partículas igual ao tamanho médio do substrato nesse intervalo, e duplicadas δ colunas em média.

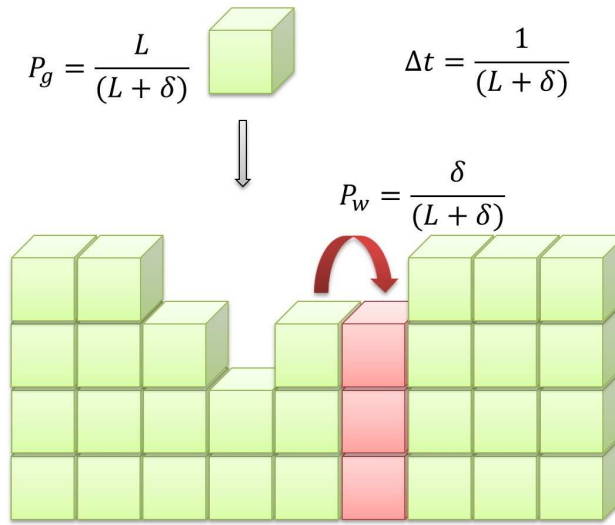


Figura 4.1: Ilustração do modelo para o crescimento lateral do substrato.

O substrato cresce com uma taxa constante porque, considerando um crescimento curvo, se o raio cresce com uma taxa constante, por exemplo, $R = vt$, o perímetro $P = 2\pi R = 2\pi vt$ também crescerá com uma taxa fixa. Como as alturas no nosso modelo crescem com $\partial_t h = v_\infty + \beta \Gamma^\beta t^{\beta-1} \chi$, que é aproximadamente constante em tempos grandes, uma taxa de crescimento lateral constante é o mais natural.

Sobre o tamanho inicial do sistema, nós escolhemos $L_0 = \delta$ porque é o menor tamanho onde haverá um número apreciável de deposições, pois se $L_0 \ll \delta$ na primeira unidade de tempo praticamente só ocorreriam duplicações. Escolhemos o tamanho inicial dessa forma porque notamos que esse parâmetro possui um efeito importante na dinâmica das distribuições de alturas. Se o tamanho inicial for muito grande, as HD's KPZ tendem inicialmente para GOE (plano) e depois convergem para a GUE. Discutiremos esse *crossover* em detalhe na seção 5.4.

4.1 Crescimento lateral do substrato

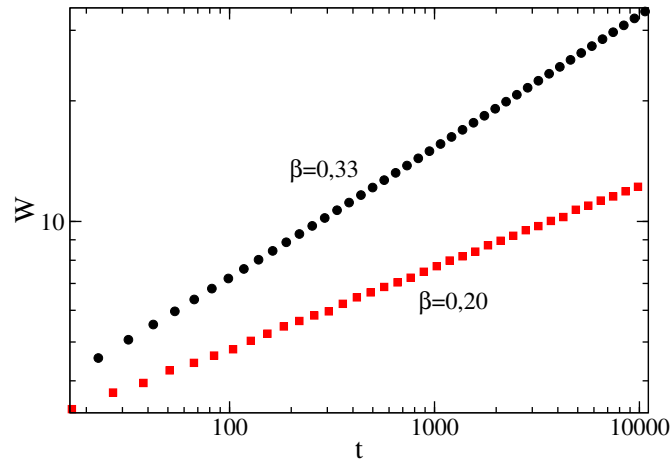


Figura 4.2: Comparação da escala da rugosidade para deposição balística em substratos crescentes de acordo com o nosso modelo (pontos pretos) e o de [20] (pontos vermelhos).

Quando testamos o algoritmo de [20] no modelo de deposição balística em $d = 1 + 1$, definido na seção 4.3, que não possui restrições de altura, obtivemos expoentes de crescimento muito distantes do $\beta = 1/3$ da classe KPZ. No entanto, se apenas duplicamos as colunas, como foi feito em [21], o expoente fica muito mais próximo, como mostrado na figura 4.2. Isso ocorre porque ao acrescentar um sítio com uma altura qualquer da HD da interface, pode acontecer dessa nova coluna possuir altura muito diferente dos seus vizinhos. Uma coluna com altura muito maior que os vizinhos, por exemplo, produzirá o crescimento lateral de uma estrutura sombreando toda sua extensão. Isso deve introduzir fortes correlações de escala no sistema.

No modelo RSOS utilizado em [20], as diferenças de altura são no máximo ± 1 . Para uma coluna ser adicionada, ela deve satisfazer essa condição, por isso os resultados de [20] não possuem o problema que encontramos na deposição balística. Porém, um problema dos modelos com restrição de altura é que o tempo de computação pode ser muito grande, pois podem ser necessários vários sorteios até que uma coluna que satisfaça a restrição seja encontrada.

Por causa das considerações anteriores, no nosso algoritmo a adição de colunas é feita duplicando lateralmente a altura de um sítio escolhido aleatoriamente, como é feito em [21].

4.2 Modelos discretos da classe KPZ

Diferentemente dos modelos de [20,21], aqui implementamos a dinâmica da forma mais estocástica possível, para não introduzimos correlações adicionais no sistema. Para tanto, definimos o tempo de forma a garantir que, em média, dentro de uma unidade de tempo, δ colunas fossem duplicadas e que L partículas fossem depositadas.

Nós também estudamos sistemas bidimensionais com uma variante do modelo proposto. Para isso tivemos que fazer uma simples generalização, ao invés de duplicarmos um sítio, como na rede unidimensional, passamos a duplicar uma linha ou coluna inteira de sítios. Assim, vamos ter três eventos possíveis na rede: depositar uma partícula, duplicar uma linha ou uma coluna. Então, foi necessário redefinir as probabilidades. A chance de haver uma deposição continua sendo $P_g = \frac{L_1 L_2}{L_1 L_2 + 2\delta}$, onde L_1 e L_2 são os lados do substrato e δ é a velocidade de crescimento em cada direção, ou seja, o número médio de colunas (ou linhas) que serão duplicadas por unidade de tempo. Dividimos igualmente a probabilidade de duplicação entre linhas e colunas, assim ambas são $P_{w1} = P_{w2} = \frac{\delta}{L_1 L_2 + 2\delta}$. Ilustramos essa generalização na figura 4.3.

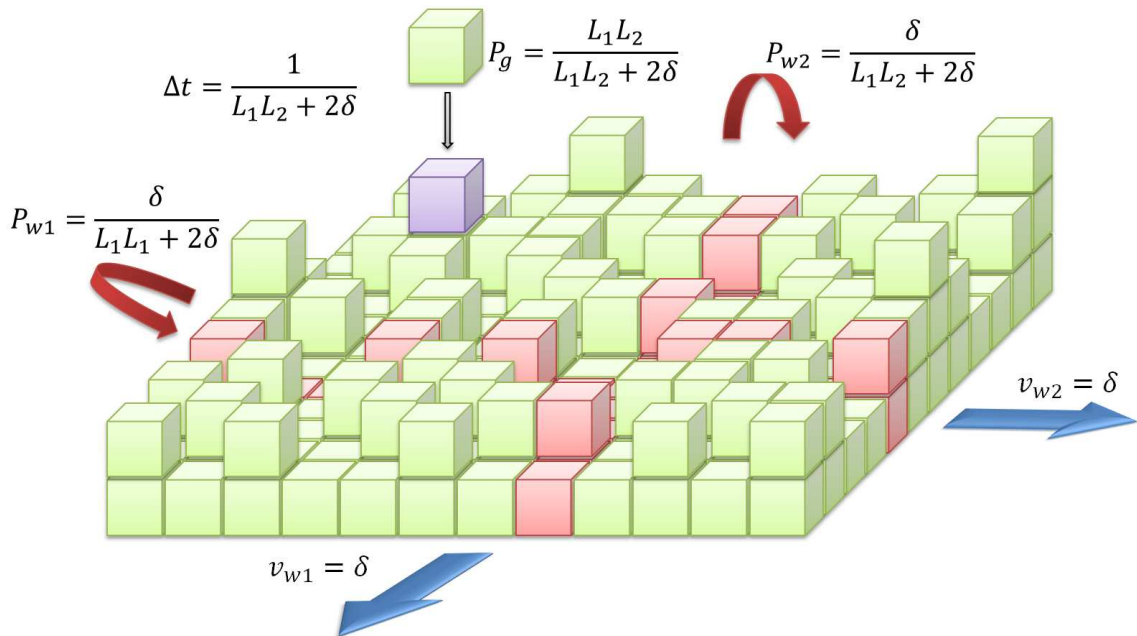


Figura 4.3: Generalização do modelo para interfaces bidimensionais.

4.2 Modelos discretos da classe KPZ

Nesta seção vamos apresentar as regras de agregação de todos os modelos que estudamos. Como estamos interessados na distribuição de alturas da classe KPZ, todos os modelos dessa seção pertencem a essa classe. Nós vamos apresentar apenas as regras unidimensionais dos modelos, pois sua generalização para duas dimensões é imediata.

4.2.1 *Restricted solid on solid (RSOS)*

Esse modelo foi proposto por Kim e Kosterlitz [38]. A regra consiste em restringir as diferenças de altura da superfície, o que é feito definindo um parâmetro M como a maior diferença de altura permitida entre sítios primeiros vizinhos. Iniciando com um substrato liso de tamanho L , o crescimento transcorre tentando se depositar L partículas por unidade de tempo em sítios sorteados aleatoriamente. Se a deposição de uma partícula irá produzir diferença de altura maior que M , a partícula é rejeitada.

A recusa de partículas nesse modelo é responsável pelo excesso de velocidade característico da classe KPZ. Nesse caso, em vez de um crescimento normal a interface, existe uma recusa a crescimento em porções inclinadas da interface. Essa redução é equivalente a um λ negativo na equação KPZ (eq. 2.30). Dessa forma, a taxa de crescimento da altura média é menor que o fluxo de partículas e, assim, o excesso de velocidade é negativo.

Quando a restrição de altura é feita igual a um, o modelo RSOS é o que possui correções mais fracas dentre os dessa classe. Por isso ele é o modelo discreto mais utilizado para representar a classe KPZ. Todos os gráficos da seção 2.2 foram feitos utilizando esse modelo.

Em uma dimensão, os parâmetros não universais desse modelo foram obtidos numericamente em [35]. Sendo $v_\infty = 0,419030(3)$, $\Gamma = 0,252(1)$ e $\langle \eta \rangle = -0,32(4)$. Também existem resultados numéricos para duas dimensões que, de acordo com [26], são: $v_\infty = 0,31270$, $\Gamma = 0,66144$ e $\langle \eta \rangle = -0,5(1)$. Esses últimos resultados não possuem barras de erro porque o autor calculou apenas o valor médio.

4.2 Modelos discretos da classe KPZ

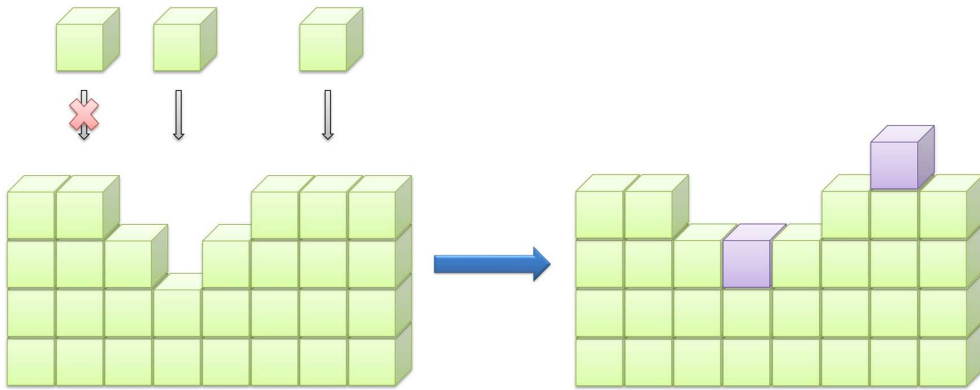


Figura 4.4: Ilustração da regra de crescimento do modelo RSOS com restrição $M = 1$.

4.2.2 Etching

Esse modelo foi proposto por Melo *et. al* em [25]. Nele o crescimento inicia com um substrato liso de tamanho L , onde deposita-se L partículas por unidade de tempo em sítios sorteados aleatoriamente. Ao depositar uma partícula em um sítio i da rede, analisa-se as alturas dos sítios primeiros vizinhos, o sítio que possuir altura menor que $h(i) - 1$ deverá ser crescido até esse valor.

A regra de crescimento desse modelo é ilustrada na figura 4.5. Nesse modelo as alturas do depósito crescem de um valor maior que o número total de partículas adicionadas ao sistema, o que deixa bem claro a presença de um excesso de velocidade. Relacionando com a equação KPZ (eq. 2.30), esse crescimento extra estaria associado a um λ positivo, ao contrário do modelo RSOS.

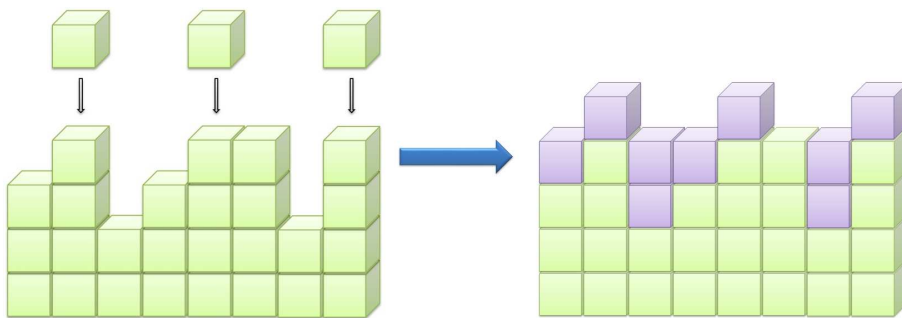


Figura 4.5: Ilustração da regra de crescimento do modelo de *Etching*.

4.2 Modelos discretos da classe KPZ

Para duas dimensões, os parâmetros não universais desse modelo foram calculados em [28]. Foi encontrado $v_\infty = 3,3340(1)$, $(\Gamma)^\beta \langle \chi \rangle = -2,348(3)$ e $\langle \eta \rangle = 0,6(1)$. Nesse trabalho os autores não calcularam explicitamente o valor de Γ por não haver cálculos analíticos da distribuição de alturas em duas dimensões.

Nós não encontramos na literatura resultados para os parâmetros não universais em uma dimensão. Para estimá-los, nós crescemos superfícies com 2^{20} sítios até um tempo final de $t = 5 \times 10^3$. No total, foram utilizadas 250 amostras para a realização da estatística. Para obter v_∞ , nós derivamos a equação 2.34 em relação ao tempo, que resulta em

$$\frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} = v_\infty + \beta \Gamma^\beta t^{\beta-1} \langle \chi \rangle \quad (4.1)$$

Dessa forma, se traçamos um gráfico de $\partial h / \partial t$ em função de $t^{\beta-1}$ devemos obter uma reta, como mostrado na figura 4.6(a). Extrapolando essa reta para $t \rightarrow \infty$ obtemos o valor $v_\infty = 2,13995(8)$.

Para obtermos o valor de Γ nós isolamos o termo $\Gamma^\beta t^{\beta-1}$. Na figura 4.6(b) traçamos um gráfico de $\frac{\partial h - v_\infty}{\beta \langle \chi \rangle}$ em função de t . Para determinar o valor de Γ ajustamos uma lei de potência na região de tempos grandes, onde as correções devem estar mais próximas de zero. O resultado que obtivemos foi $\Gamma = 4,90(9)$.

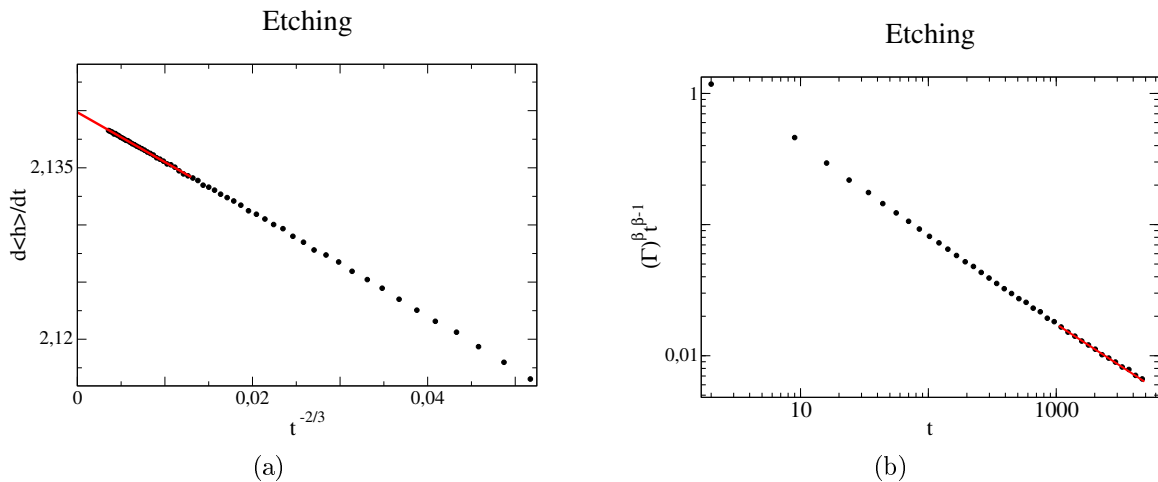


Figura 4.6: (a) Gráfico utilizado na estimativa do valor de v_∞ . Esse valor foi obtido extrapolando diversos ajustes realizados na região de $t^{-2/3}$ pequenos. (b) Estimativa do valor de Γ . Para isso diversas leis de potência foram ajustadas na região de tempos grandes.

4.2 Modelos discretos da classe KPZ

4.2.3 *Single-step*

A definição desse modelo pode ser encontrada em [24]. Esse modelo é de certa forma similar ao RSOS com $M = 1$, por também produzir superfícies bem suaves e com correções relativamente fracas. Nele, as diferenças de altura são sempre iguais a um, o que difere do RSOS que permite alturas iguais. Nesse modelo, começamos com um substrato que tenha a menor rugosidade e satisfaça a condição de diferenças de altura sempre igual a um, ou seja, sítios de altura um e zero alternados em todo o substrato. As partículas desse modelo são dímeros verticais e são aceitas apenas quando depositadas em mínimos locais. A regra de crescimento é ilustrada na figura 4.7.

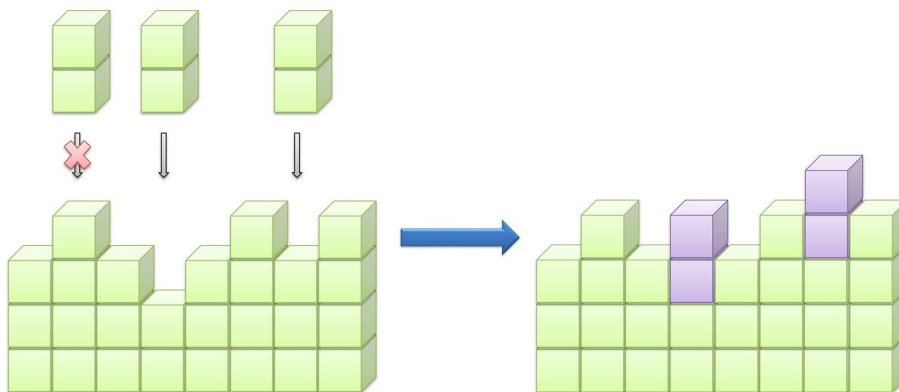


Figura 4.7: Ilustração da regra de crescimento do modelo *Single-step*

Esse modelo é similar ao RSOS no sentido de não depositar em porções inclinadas da interface, e assim temos uma recusa a crescimento lateral. Como no RSOS, o λ é negativo relacionado a um excesso de velocidade que reduz a evolução da altura média.

A exigência de que as diferenças de altura sejam sempre iguais a 1 nos impede de aplicar a regra de crescimento lateral do substrato na forma como definimos na seção 4.1. Isso porque ao duplicar uma coluna criamos uma diferença de altura nula na superfície. Para continuar satisfazendo a condição do *Single-step*, nós temos que duplicar duas colunas, a sorteada e a de seu vizinho esquerdo, como ilustrado na figura

4.3 Outros modelos

4.8. Dessa maneira, a velocidade de crescimento lateral passa a ser $v_w = 2\delta$.

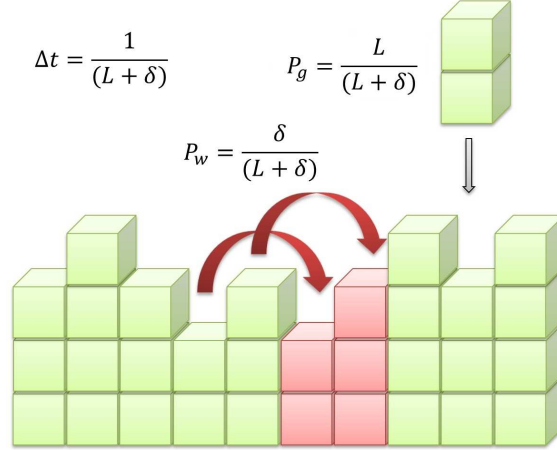


Figura 4.8: Regra de crescimento lateral do substrato para o modelo de Single-step.

Para uma dimensão, esse modelo pode ser mapeado no problema de uma rede linear com partículas de *spin* meio. Através dessa mudança de representação, os parâmetros não universais foram calculados analiticamente em [63], onde foi obtido $v_\infty = 1/2$ e $\Gamma = 1/2$. Para duas dimensões, esses parâmetros foram determinados numericamente em [28], sendo $v_\infty = 0,341368(3)$, $(\Gamma)^\beta \langle \chi \rangle = -0,881(1)$ e $\langle \eta \rangle = -0,6(1)$.

4.3 Outros modelos

Nesta seção, vamos apenas definir a regra de crescimento de dois modelos que foram utilizados em alguns testes que realizamos. Um deles é o modelo de deposição balística, que pertence a classe KPZ. Nele, a partícula se agrega exatamente na posição em que toca a interface. Na rede, se depositamos uma partícula no sítio i , teremos $h(i) = \max[h(i-1), h(i)+1, h(i+1)]$, como mostrado na figura 4.9. Mais informações sobre esse modelo podem ser encontradas em [6,60,61].

O segundo modelo que vamos definir é o de Family, que é pertencente a classe EW. Nesse modelo, a partícula recém depositada pode difundir lateralmente caso os vizinhos do sítio selecionado tenham alturas menores. Ela se agregará na posição de menor altura entre os seus vizinhos e a coluna de incidência i . Se as alturas dos

4.3 Outros modelos

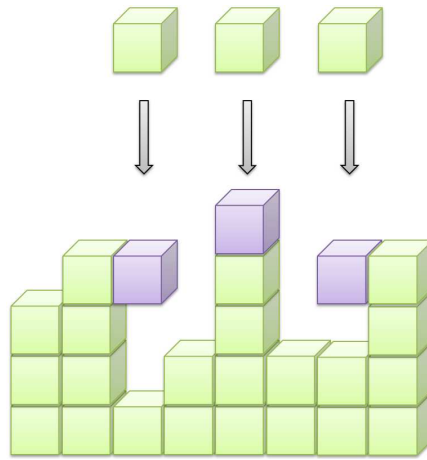


Figura 4.9: Ilustração da regra de crescimento do modelo de deposição balística.

vizinhos forem iguais e menores que h_i , um sorteio é realizado para definir em qual sítio a partícula se agrega, como mostrado na figura 4.10. Mais informações sobre esse modelo podem ser encontradas em [6,62].

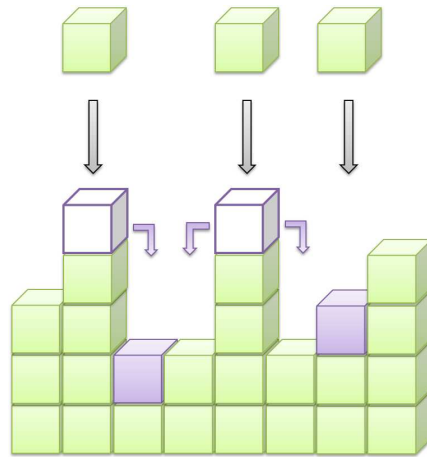


Figura 4.10: Ilustração da regra de crescimento do modelo de Family.

Capítulo 5

Resultados em uma dimensão

Neste capítulo vamos apresentar os resultados das nossas simulações de domínios crescentes em uma dimensão. Como dito no capítulo passado, estudamos os modelos de *Etching*, RSOS e *Single-step*. Para cada modelo, crescemos superfícies com velocidades laterais $v_w = 6, 12, 20$ e 100 colunas por unidade de tempo. Para cada velocidade, crescemos entre dez mil e vinte mil amostras. Na primeira seção vamos mostrar os expoentes de crescimento obtidos iniciando o substrato com tamanho $L_0 = v_w$. Em seguida vamos discutir a distribuição de altura desses modelos em substratos crescentes. Depois vamos discutir como as duplicações produzem as correções logarítmicas que aparecem nesses crescimentos. Por último, vamos mostrar o efeito do tamanho inicial do substrato, que produz um *crossover* de GOE para GUE quando L_0 é muito grande.

5.1 Expoente de crescimento

Conforme discutido no capítulo 3, em trabalhos anteriores considerando substratos crescentes [20,21], o foco principal foi o expoente de crescimento. Nós analisamos a evolução temporal do expoente de crescimento efetivo, obtido calculando a derivada da curva de $\ln W$ por $\ln t$. Dessa forma, temos expoentes efetivos que dependem do tempo. Na figura 5.1(a) apresentamos tais expoentes para o modelo RSOS em substratos que aumentam lateralmente. Nesse gráfico, podemos notar que a convergência do expoente de crescimento depende da velocidade lateral, ou seja, as correções de

5.2 Distribuição de altura

escala dependem de v_w . Esse comportamento é similar no modelo *Single-step*. No modelo de *Etching* a convergência do expoente também depende da velocidade lateral, porém de uma maneira diferente como pode ser notado na figura 5.1(b). No entanto, para todas as velocidades e todos os modelos notamos que o expoente converge para $\beta = 1/3$ em tempos longos. Dessa forma, o expoente de crescimento desses sistemas que crescem lateralmente continuam consistentes com a classe KPZ, como também foi encontrado em [20,21].

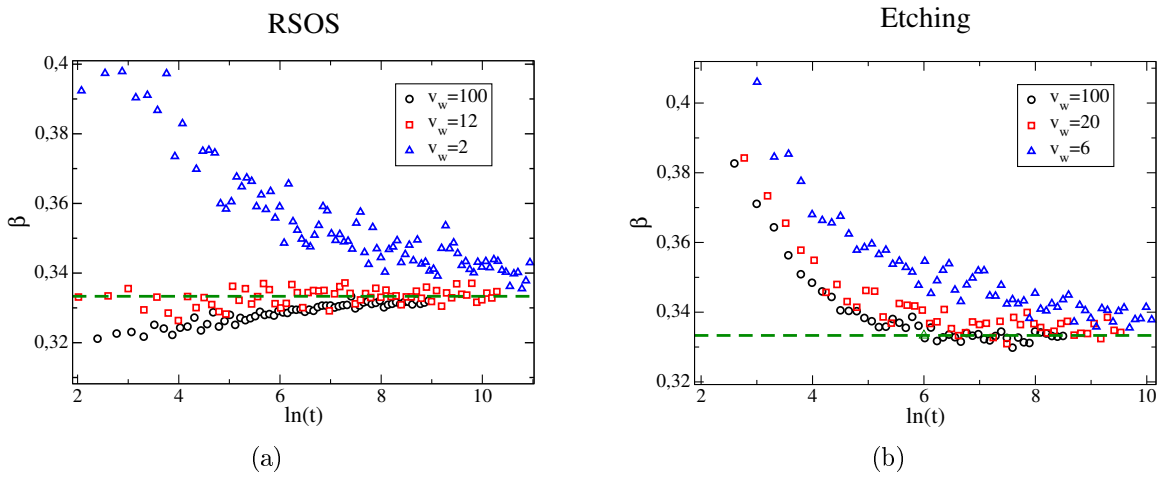


Figura 5.1: Expoente de crescimento dos modelos (a) RSOS e (b) *Etching* para diferentes velocidades laterais. As linhas tracejada são correspondentes a $\beta = 1/3$.

5.2 Distribuições de alturas

Vamos iniciar a nossa discussão sobre as distribuições de alturas dos domínios crescentes apresentando os nossos resultados para *skewness* e *curtose*. Vamos repetir aqui a equação 2.35 para facilitar a leitura, sendo ela

$$h(x, t) = v_\infty t + \text{sig}(\lambda)(\Gamma t)^\beta \chi + \eta + \zeta t^{-\gamma} + \dots \quad (5.1)$$

Obter a relação entre a *skewness* da distribuição de altura e a da variável χ é simples, pois o termo $v_\infty t$, e demais termos determinísticos, da equação 5.1 se cancelam no cálculo dos cumulantes de ordem maior que um. Assim, como pode ser facilmente

5.2 Distribuição de altura

mostrado, o termo dominante nesses cumulantes é $\langle h^n \rangle_c = (\Gamma t)^{n\beta} \langle \chi^n \rangle_c + \dots$. Quando calculamos a *skewness* temos

$$S = \frac{\langle h^3 \rangle_c}{\langle h^2 \rangle_c^{3/2}} = \frac{(\Gamma t)^{3\beta} \langle \chi^3 \rangle_c + \dots}{((\Gamma t)^{2\beta} \langle \chi^2 \rangle_c + \dots)^{3/2}} \approx \frac{\langle \chi^3 \rangle_c}{\langle \chi^2 \rangle_c^{3/2}} + \dots \quad (5.2)$$

Dessa forma, a relação entre a *skewness* da HD e a da distribuição da variável χ é direta. Um cálculo análogo mostra que o mesmo é válido para a curtose.

Nas figuras 5.2(a) e 5.2(b) apresentamos a dinâmica da *skewness* e a da curtose para o modelo *Single-step* em substratos crescentes. Esses gráficos mostram que tanto a *skewness* quanto a curtose são muito mais próximas da GUE (curvo) do que da GOE. Essas curvas deixam evidente que no regime assintótico ($t \rightarrow \infty$), esses cumulantes tendem para GUE. Além disso, a convergência dessas grandezas depende da velocidade de crescimento lateral. Analisando esses gráficos fica evidente que, na gama de valores que estudamos, quanto maior a velocidade lateral mais rápido a distribuição se aproxima da GUE. Esse comportamento se repete nos modelos RSOS e *Etching*.

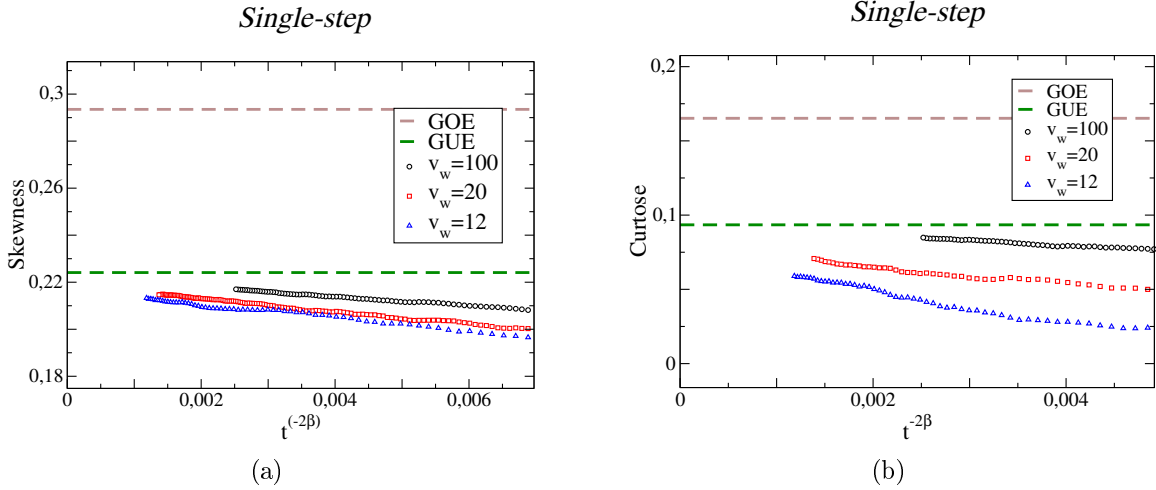


Figura 5.2: Gráficos da (a) *Skewness* e da (b) Curtose em função de $t^{-2\beta}$ da distribuição de alturas do modelo *Single-step* em substratos que crescem lateralmente.

A dinâmica da *skewness* e a da curtose nos permite afirmar que o segundo, terceiro e o quarto cumulantes da distribuição de alturas tendem assintoticamente para a distribuição do caso curvo. A análise do primeiro cumulante é um pouco mais trabalhosa, pois todos os termos da equação 5.1 são relevantes. Para estudar esse cumulante

5.2 Distribuição de altura

vamos usar os mesmos parâmetros v_∞ e Γ que foram calculados para os substratos com tamanho fixo. A coerência dos cálculos que vamos realizar nessa seção evidencia que esses parâmetros de fato não mudam, caso contrário, efeitos análogos aos que vamos discutir no próximo parágrafo ocorreriam em todas as análises que realizássemos. Na seção 5.3, vamos discutir mais sobre a invariância desses parâmetros.

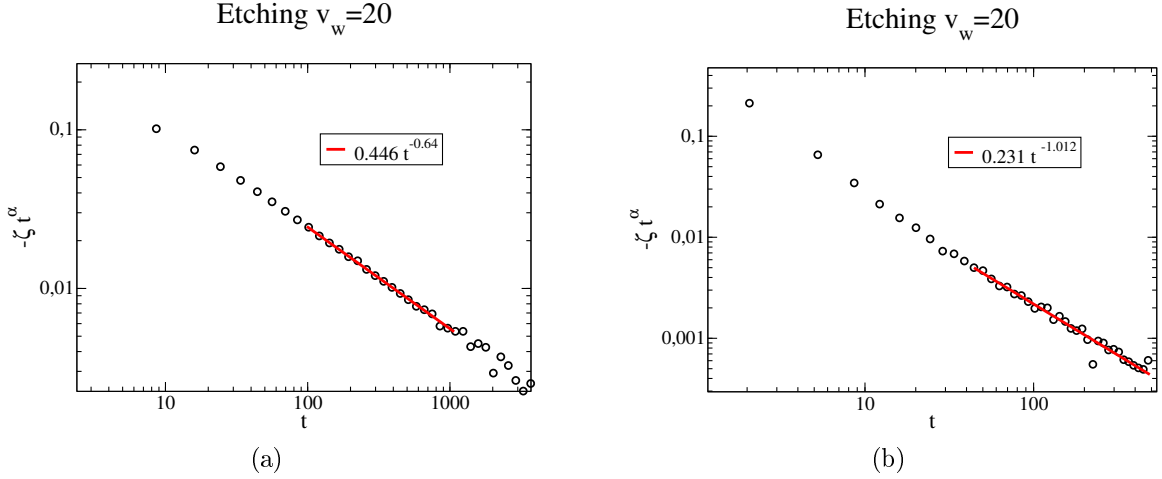


Figura 5.3: Cálculo da correção $\zeta t^{-\beta-1}$ usando a média da (a) GOE e da (b) GUE.

Considerando que v_∞ e Γ são os mesmos, para estudar a $\langle h \rangle$ precisamos obter η e ζ . Podemos eliminar o η tirando a média e derivando a equação 5.1, o que resulta em

$$\frac{\partial \langle h(x, t) \rangle}{\partial t} = v_\infty + \text{sig}(\lambda) \beta \Gamma^\beta t^{\beta-1} \langle \chi \rangle - \gamma \zeta t^{-\gamma-1} + \dots \quad (5.3)$$

Dessa forma, podemos calcular o valor de ζ se soubermos o valor de $\langle \chi \rangle$. Como o termo $\text{sig}(\lambda) \beta \Gamma^\beta t^{\beta-1} \langle \chi \rangle$ tende a zero muito mais lentamente que a correção $\zeta t^{-\gamma-1}$, se utilizarmos um valor errado na $\langle \chi \rangle$ vamos obter uma curva relacionada a diferença entre esse valor e o correto. Isolando o termo $\zeta t^{-\gamma-1}$, se utilizamos a média da GOE, como na figura 5.3(a), obtemos uma função que decai com $t^{-0.64}$. No entanto, $-0.64 \approx \beta - 1$, que é a lei de potencia do termo que multiplica $\langle \chi \rangle$, logo, a média da GOE não é o valor correto. Por outro lado, se utilizarmos o valor da média da GUE, como na figura 5.3(b), obtemos uma curva que decai mais rápido que $t^{\beta-1}$.¹ Dessa forma, podemos dizer que o primeiro cumulante da distribuição de altura também converge assintoticamente para

¹Note que se o valor de Γ fosse diferente, continuaríamos tendo uma curva que decai aproximadamente com $t^{\beta-1}$.

5.2 Distribuição de altura

o caso curvo. Além disso, a derivada da correção decai aproximadamente com t^{-1} , ou seja, temos que $\zeta t^{-\gamma} \rightarrow \zeta \ln t$ na equação 5.1. Esse logaritmo apareceu em todas as velocidades laterais dos modelos que estudamos. Assim, obtemos que as alturas desses substratos que crescem lateralmente são dada por

$$h(x, t) = v_{\infty} t + \text{sig}(\lambda)(\Gamma t)^{\beta} \chi + \eta + \zeta \ln t + \dots \quad (5.4)$$

Os valores ζ obtidos para os modelos RSOS, *Etching* e *Single-step* são apresentados nos gráficos 5.4(a), 5.4(b) e 5.4(c) respectivamente. Como esses gráficos mostram, para cada modelo, ζ não depende muito da velocidade lateral, esse valor é aproximadamente constante dentro das barras de erro.

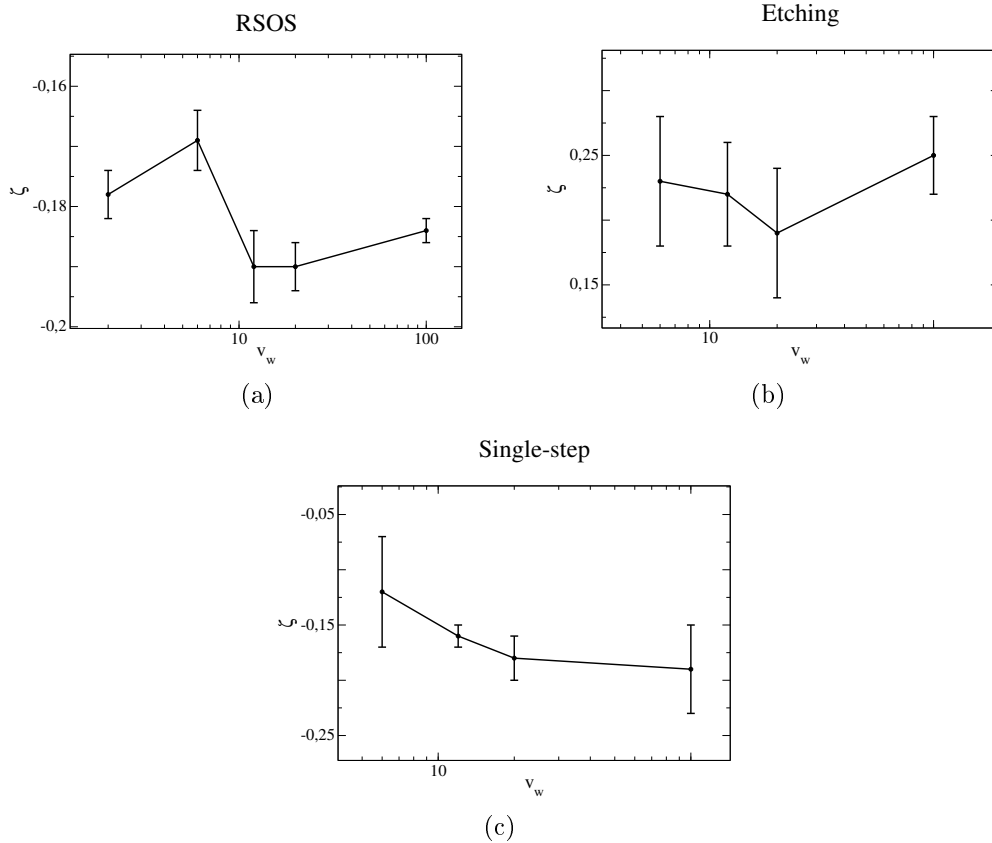


Figura 5.4: Gráficos de ζ para as diferentes velocidades dos modelos (a) RSOS, (b) *Etching* e (c) *Single-step*.

Podemos confirmar a presença desse logaritmo tentando calcular o deslocamento

5.2 Distribuição de altura

$\langle \eta \rangle$ da distribuição. Para isso isolamos esse termo da seguinte forma

$$\frac{\langle h \rangle - v_\infty t - \zeta \ln t}{(\Gamma t)^\beta} - \langle \chi \rangle = \frac{\langle \eta \rangle}{(\Gamma t)^\beta} \quad (5.5)$$

Na figura 5.5(a) traçamos o gráfico de $\langle \eta \rangle / (\Gamma t)^\beta$ sem considerar a correção logarítmica $\zeta \ln t$. Analisando essa curva em escala logarítmica fica evidente que ela não segue uma lei de potência bem definida, impossibilitando o cálculo de $\langle \eta \rangle$. Porém, se consideramos o termo $\zeta \ln t$, como em 5.5(b), obtemos uma curva que decai aproximadamente com $t^{-\beta}$, que é consistente com $\langle \eta \rangle / (\Gamma t)^\beta$, o que nos permite calcular os desvio na distribuição. Dessa forma, o logaritmo de fato faz parte da equação que descreve as alturas da interface.

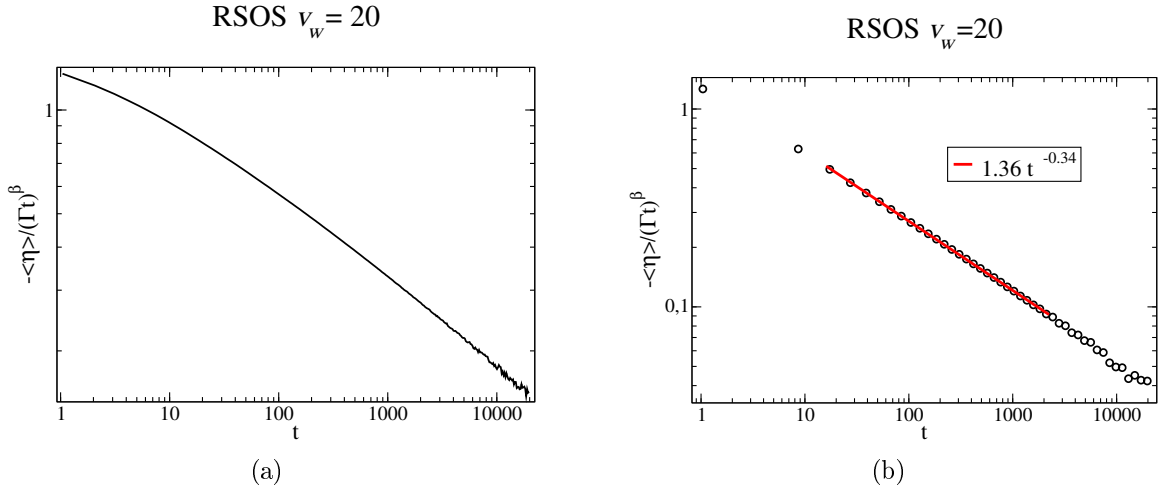


Figura 5.5: Cálculo do desvio da distribuição (a) sem considerar o $\zeta \ln t$, e em (b) considerando essa correção.

Nós calculamos o valor desse desvio para as diferentes velocidades laterais dos modelos que estudamos, apresentamos esses valores nos gráficos 5.6(a), 5.6(b) e 5.6(c). Assim como ζ , esses gráficos mostram que $\langle \eta \rangle$ também não varia significativamente com a velocidade.

Como já ficou implícito pela notação que utilizamos até aqui, ζ é uma variável determinística e η é uma variável aleatória. Para explicitar a natureza dessas variáveis, consideramos a equação 5.4 para calcular o segundo cumulante da distribuição de

5.2 Distribuição de altura

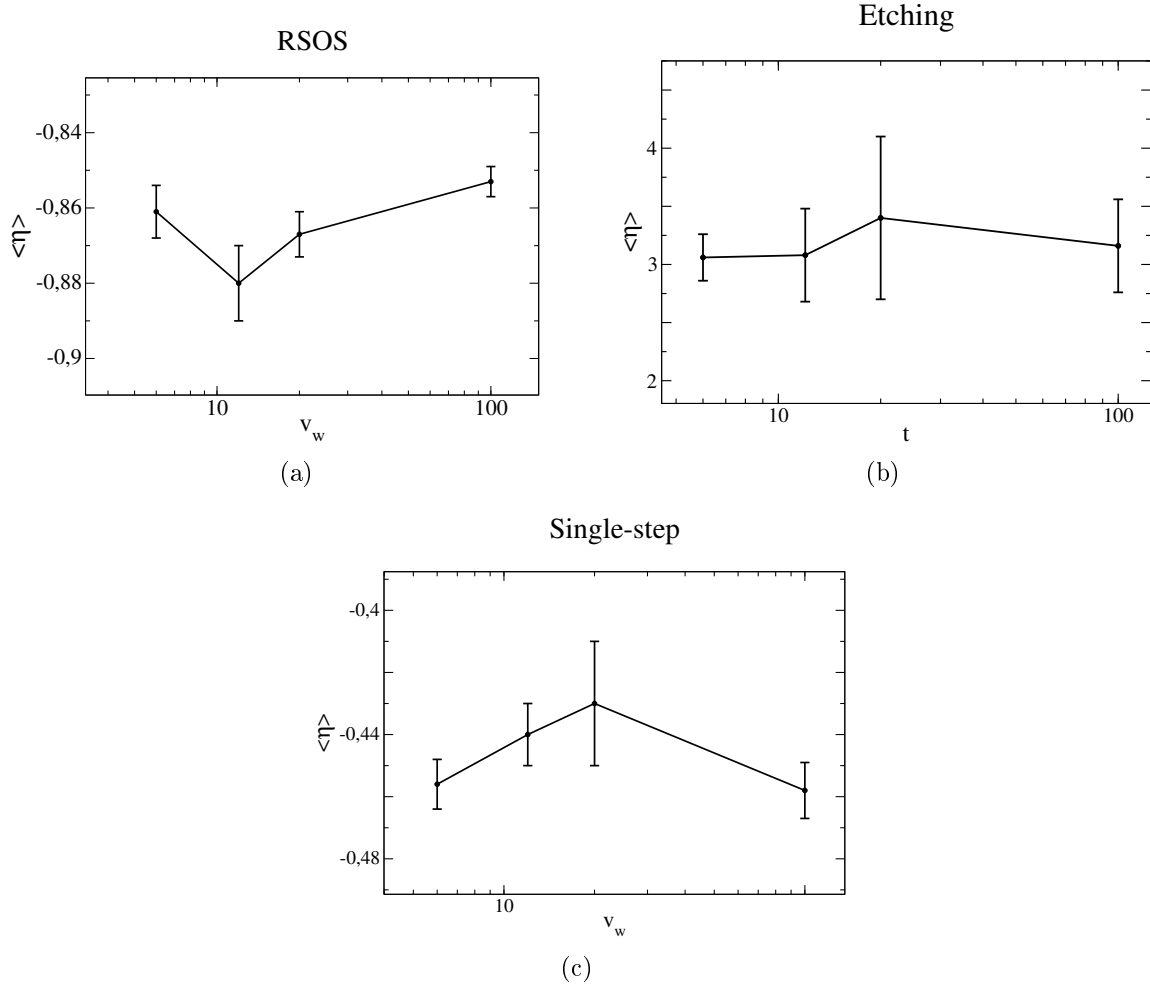


Figura 5.6: Gráficos de $\langle \eta \rangle$ para as diferentes velocidades dos modelos (a) RSOS, (b) *Etching* e (c) *Single-step*.

alturas, o que resulta em

$$\langle h^2 \rangle_c = (\Gamma t)^{2\beta} \langle \chi^2 \rangle_c + \langle \eta^2 \rangle_c + \langle \zeta^2 \rangle_c \ln^2 t + \dots \quad , \quad (5.6)$$

onde supomos que não existe correlação entre as variáveis χ , η e ζ . Para mostrar que ζ é determinístico, derivamos essa equação e manipulamos para obter

$$\partial_t \langle h^2 \rangle_c - 2\beta \Gamma^{2\beta} t^{2\beta-1} \langle \chi^2 \rangle_c = 2 \langle \zeta^2 \rangle_c \frac{\ln t}{t} + \dots \quad . \quad (5.7)$$

Na figura 5.7(a), traçamos um gráfico da função do lado esquerdo da equação anterior, usando $\langle \chi^2 \rangle_c$ da GUE. Como essa figura deixa claro, essa curva tende a zero muito mais

5.2 Distribuição de altura

rápido que $\ln t/t$, logo, a variância de ζ é nula e, assim, ela é uma variável determinística.

Com relação a η , voltamos na equação 5.6 e isolamos $\langle \eta^2 \rangle_c$. Na figura 5.7(b), traçamos um gráfico de $\langle \eta^2 \rangle_c + \dots$ em função de t . Apesar dessa curva não nos permitir calcular o valor de $\langle \eta^2 \rangle_c$, o fato dela não tender a zero mostra que $\langle \eta^2 \rangle_c \neq 0$, ou seja, η é uma variável aleatória. Como termos determinísticos se anulam na equação 5.6, a variação temporal da curva em 5.7(b) mostra que existem correções estocásticas de ordem superior no tempo. Além disso, essas correções de ordem superior devem ser função da velocidade de crescimento lateral, pois elas seriam responsáveis pela convergência da distribuição de altura depender dessa velocidade, como as figuras 5.2(a) e 5.2(b) mostram.

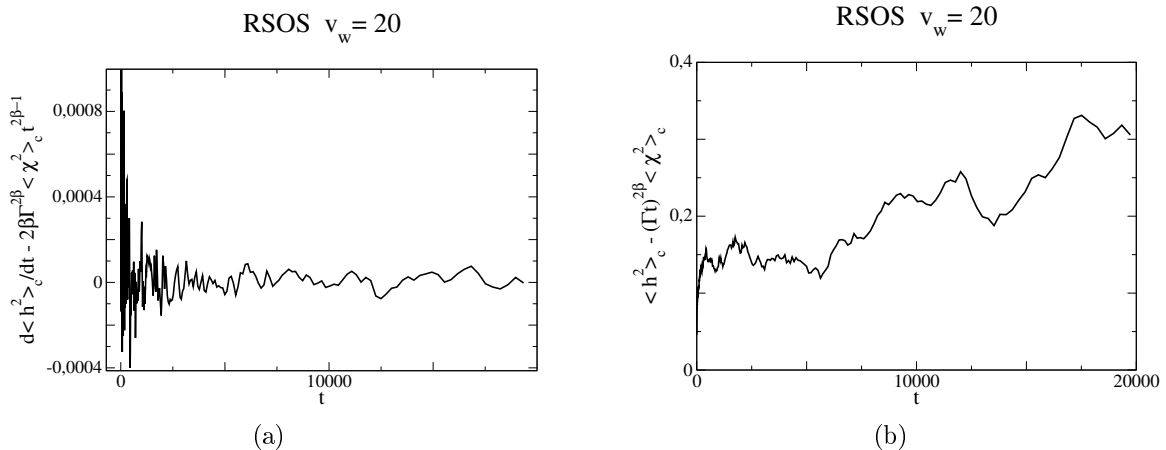


Figura 5.7: (a) Gráfico que mostra o caráter determinístico de ζ . (b) Curva que mostra a existência de correções de ordem maior em 5.4 e que $\langle \eta^2 \rangle_c \neq 0$.

A rigor, não podemos dizer que $\zeta \ln t$ é uma correção, pois esse termo diverge quando $t \rightarrow \infty$. No entanto, ele é sempre muito menor que os termos $v_\infty t$ e $(\Gamma t)^\beta \chi$. Dessa forma, podemos dizer que $\zeta \ln t$ representa uma espécie de correção forte causada pela duplicação das colunas. Na seção 5.3 vamos comentar mais sobre esse logaritmo e suas origens.

É intrigante, de certa forma, que as distribuições de alturas dos domínios crescentes de fato convirjam para o caso curvo. A interface é plana nesses modelos que estudamos, não há curvatura global, o substrato apenas cresce lateralmente. Quando consideramos que uma interface curva é basicamente composta por um perímetro cres-

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções

cente e uma curvatura global, a primeira vista a curvatura é a componente mais característica. Na próxima seção vamos deixar claro o que causa a mudança $\chi_{goe} \rightarrow \chi_{gue}$ nos sistemas de substrato crescente.

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções


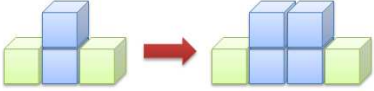



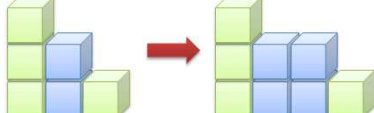
		Transições	$\Delta\langle h \rangle$	$\Delta\langle \vec{v}^2 h \rangle$	$\Delta\langle (\vec{v}h)^2 \rangle$
A		$A \rightarrow A, A$	0	0	0
B		$B \rightarrow E, E$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{6}$
C		$C \rightarrow D, D$	$-\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{6}$
D		$D \rightarrow D, A$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$
E		$E \rightarrow A, E$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$
F		$F \rightarrow D, E$	0	0	$-\frac{1}{6}$

Figura 5.8: Representação dos efeitos das duplicações sobre as principais características da rede.

Vamos iniciar a nossa discussão considerando a figura 5.8, onde consideramos todos os tipos de vizinhanças que podem existir para um sítio do modelo RSOS em $d = 1+1$. Na verdade, existem mais três tipos de sítios, porém eles são apenas reflexões em torno do sítio central dos tipos D , E e F , assim, para simplificar, consideramos que esses três tipos também representam suas reflexões. Estamos interessados em identificar o que muda nessas pequenas porções da interface quando duplicamos os sítios destacados em azul. Na coluna intitulada *Transições* estamos mostrando que tipos de sítios são produzidos quando ocorre uma duplicação. Por exemplo, na última linha

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções

temos $F \rightarrow D, E$, que significa que ao duplicarmos um sítio do tipo F ele se transforma em um sítio do tipo D e produz um outro sítio do tipo E . Nas colunas seguintes mostramos como várias propriedades superficiais são alteradas pela duplicação.

Na coluna $\Delta\langle h \rangle$ mostramos como a duplicação muda localmente a altura média, ou seja, a altura média do conjunto de três, ou quatro sítios. Para ilustrar, vamos considerar a segunda linha. Tomando a altura mais baixa igual a zero, antes da duplicação a altura média desses três sítios é $1/3$, após a duplicação temos quatro sítios com altura média $1/2$. Para calcularmos o efeito total das duplicações sobre a altura média, não basta simplesmente somar essa coluna, isso porque esses sítios não aparecem na rede com mesma frequência, ou probabilidade. A figura 5.9 mostra com que probabilidade cada tipo de sítio é encontrado na rede de tamanho fixo (curvas tracejadas) e na crescente (linhas sólidas). Note como os sítios do tipo F se tornam menos frequentes quando fazemos as duplicações, então, a probabilidade dos demais sítios deve aumentar. A figura 5.9 deixa claro que o maior aumento ocorre nos sítios A, D e E , que são aqueles com vizinhos de mesma altura, como era de se esperar por se tratar de duplicações.

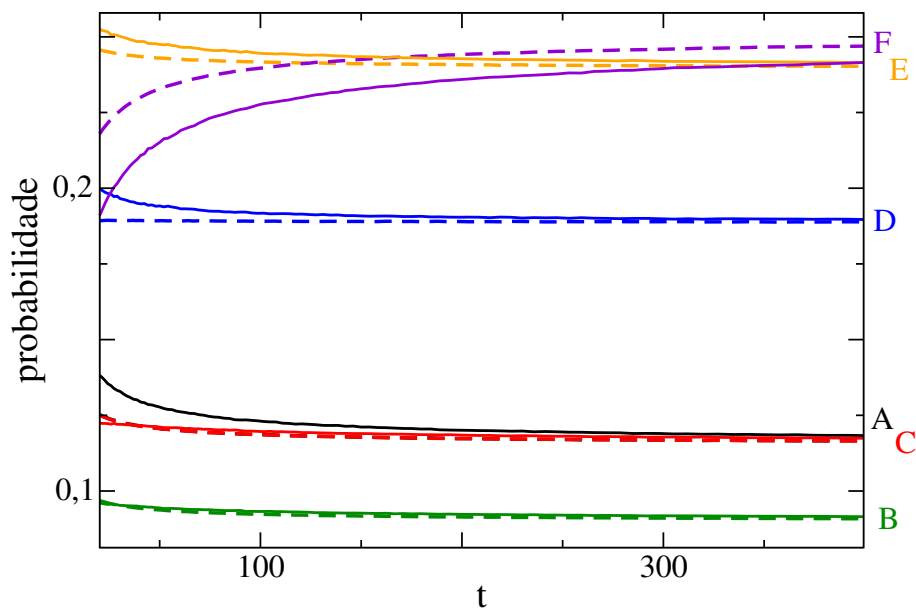


Figura 5.9: Gráfico com as probabilidades de cada tipo de sítio ser encontrado na rede. As linhas tracejadas são relacionadas a sistemas com tamanho fixo e as sólidas aos crescentes.

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções

Analisando as diferenças de probabilidade entre o substrato de tamanho fixo e o crescente, podemos verificar se haverá acréscimo líquido na altura média causado pelas duplicações. Como A e F não produzem $\Delta\langle h \rangle$ as diferenças em suas probabilidades não é importante para a altura média. Os sítios do tipo B e C quase não alteram sua probabilidade e, assim, também não causarão nenhum efeito. Já nos sítios D e E , as probabilidades mudam de uma quantidade aproximadamente igual. Como os $\Delta\langle h \rangle$'s introduzido por eles possuem mesmo módulo, porém, sinais contrários, tais duplicações também não devem causar efeitos líquidos.

Para confirmar que o efeito líquido das duplicações na média se anulam, nós realizamos simulações registrando a variação na altura média da interface causada por cada duplicação. Nesse caso estamos analisando a diferença introduzida na interface como um todo, e não apenas no sítio duplicado e sua vizinhança. Nós tiramos a média entre diversas amostras do $\Delta\langle h \rangle$ total introduzido por unidade de tempo. Como podemos ver na figura 5.10, esses valores flutuam em torno de zero com amplitude que rapidamente fica menor que 10^{-6} . Se calculamos a média total dessa curva no tempo, o resultado é da ordem de 10^{-9} . Esses resultados nos indicam que de fato o $\Delta\langle h \rangle$ deve ser zero. Pensando mais a fundo notamos que isso era de se esperar, pois ao sortearmos colunas da rede para duplicar, nós estamos introduzindo alturas aleatoriamente de acordo com a distribuição de alturas, assim naturalmente a média dessas contribuições coincide com a média da distribuição. Dessa forma, podemos dizer que na média os $\Delta\langle h \rangle$'s introduzidos pelas duplicações são nulos.

Retornando a figura 5.8, na coluna $\Delta\langle \vec{\nabla}^2 h \rangle$ analisamos o efeito das duplicações sobre a média da derivada segunda. Nela calculamos a derivada segunda de forma numérica em cada sítio azul, o que é feito considerando $\Delta^2 h / \Delta x^2 = h(x+1) + h(x-1) - 2h(x)$. Podemos repetir a mesma discussão sobre a variação das probabilidades dos sítios na rede, relacionada à figura 5.9. Novamente, as contribuições de D e E , B e C , se anularam mutuamente. Para confirmar isso nós realizamos simulações que mostraram que $\langle \vec{\nabla}^2 h \rangle$ é exatamente zero em todos os instantes de tempo, mesmo após cada deposição ou duplicação. Isso confirma que não há efeito líquido na derivada segunda. Além disso, como $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$ está relacionada a curvatura da interface, esse resultado

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções

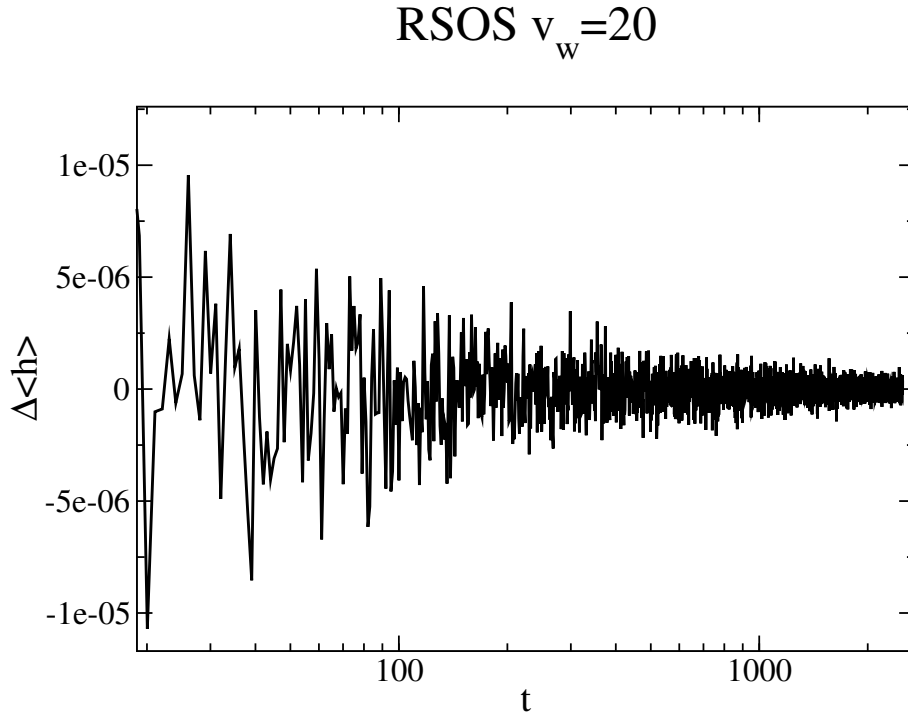


Figura 5.10: Média por unidade de tempo dos $\Delta\langle h \rangle$ introduzidos pelas duplicações.

deixa claro que duplicações não produzem uma curvatura global na rede. Esse resultado é esperado do ponto de vista analítico, pois, como é trivial de se mostrar (apêndice B), qualquer função suave com condição de contorno periódica possui $\langle \frac{d^n h}{dx^n} \rangle = 0$.

Na última coluna da figura 5.8, nós calculamos o efeito sobre a derivada primeira ao quadrado. Para isso somamos o módulo das diferenças de altura e dividimos por dois antes da duplicação, pois estamos considerando o número de degraus possíveis, e dividimos por três após a duplicação. Independentemente desses valores, todas as contribuições são negativas, o que deixa evidente que haverá uma alteração líquida nessa grandeza. De fato, o gráfico da figura 5.11(a) mostra que o $\langle (\vec{\nabla} h)^2 \rangle$ no substrato crescente (quadrados) é menor que no com tamanho fixo (círculos). Esse resultado é de certa forma intuitivo, pois se consideramos uma curva contínua que possui um morro de altura Δh e largura Δx , nesse caso contínuo as duplicações seriam uma espécie de alongamento no eixo horizontal. Antes desse alongamento teríamos $\Delta h / \Delta x$ e depois $\Delta h / \Delta x'$ com $\Delta x' > \Delta x$, logo $\Delta h / \Delta x > \Delta h / \Delta x'$, o que evidencia a redução no gradiente médio.

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções

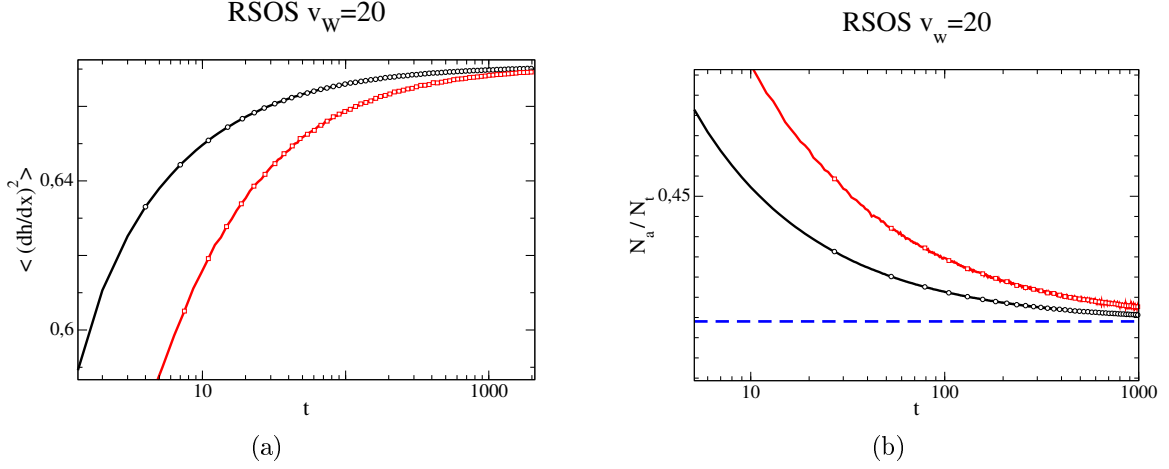


Figura 5.11: (a) Gráfico de $\langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle$ em função do tempo para substratos de tamanho fixo, curva preta (círculos), e substratos crescentes, curva vermelha (quadrados). (b) Número de partículas depositadas dividido pelo número total de partículas que tentaram ser depositadas. Curva vermelha (quadrados) está associada ao caso crescente e a preta (círculos) para substratos com tamanho fixo. A linha azul tracejada é o valor de v_∞ do modelo SOS.

Sendo a equação estocástica da classe KPZ dada por

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t), \quad (5.8)$$

discutimos na seção 4.2.1, na qual introduzimos o modelo RSOS, que nesse modelo o λ é negativo, o que reflete em uma recusa da deposição em porções inclinadas da superfície. Dessa forma, a redução do $\langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle$ deve levar a um aumento na taxa de deposição de partículas. Na figura 5.11(b), apresentamos um gráfico mostrando que no substrato crescente (quadrados) a taxa de deposição é maior que no substrato com tamanho fixo (círculos). Assim notamos que as duplicações afetam a contribuição do termo não-linear da equação KPZ.

Conhecendo o efeito das duplicações sobre a interface, podemos mostrar de onde vem a correção $\zeta \ln t$ da equação 5.4. Para isso, vamos considerar que em um instante de tempo t o substrato tenha tamanho L , dado por um conjunto $\{S\}_L = \{S_1, S_2, \dots, S_L\}$ de sítios. Se não houverem duplicações, teremos

$$\langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle_{t+1}^F = \frac{1}{L} \sum_{\{S\}_L} (\vec{\nabla}h)_F^2 \equiv \frac{K}{L}. \quad (5.9)$$

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções

Porém, se duplicamos v_w colunas no tempo t , um conjunto $\{S\}_{v_w} = \{S_{L+1}, S_{L+2}, \dots, S_{L+v_w}\}$ será introduzido no sistema e, daí,

$$\langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle_{t+1}^G = \frac{1}{L + v_w} \left(\sum_{\{S\}_L} (\vec{\nabla}h)_G^2 + \sum_{\{S\}_{v_w}} (\vec{\nabla}h)^2 \right) . \quad (5.10)$$

Se $L \gg v_w$, então $\sum_{\{S\}_L} (\vec{\nabla}h)_F^2 \approx \sum_{\{S\}_L} (\vec{\nabla}h)_G^2 \approx K$. Definindo $\vec{\nabla}h \equiv h_i - h_{i-1}$, temos que $\vec{\nabla}h \approx 0$ para todas as colunas adicionadas. Logo, $\sum_{\{S\}_{v_w}} (\vec{\nabla}h)^2 \approx 0$. Então,

$$\langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle_{t+1}^G \approx \frac{K}{L + v_w} < \langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle_{t+1}^F = \frac{K}{L} \quad (5.11)$$

Podemos escrever

$$\frac{K}{L + v_w} = \frac{K}{L} - a \Rightarrow a = \frac{K}{L} \left(1 - \frac{1}{1 + \varepsilon} \right) , \quad (5.12)$$

onde $\varepsilon \equiv v_w/L$. Se $\varepsilon \ll 1$, podemos expandir $(1 + \varepsilon)^{-1}$ e obter

$$a = \frac{K}{L} (\varepsilon + O(\varepsilon^2)) \Rightarrow a \approx \frac{K v_w}{L^2} . \quad (5.13)$$

Logo,

$$\frac{K}{L + v_w} \approx \frac{K}{L} \left(1 - \frac{v_w}{L} \right) . \quad (5.14)$$

Como $L = v_w(t + 1)$, para $t \gg 1$ temos $L \approx v_w t$ e, assim,

$$\langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle_{t+1}^G \approx \langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle_{t+1}^F \left(1 - \frac{1}{t} \right) \quad (5.15)$$

Finalmente, como

$$\frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} = \frac{\lambda}{2} \langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle^G \approx \frac{\lambda}{2} \langle (\vec{\nabla}h)^2 \rangle^F - \frac{\lambda \mu}{t} , \quad (5.16)$$

onde μ é um parâmetro que adicionamos porque a amplitude dessa correção, por causa das aproximações que fizemos, não é simplesmente λ . Assim, notamos que, de fato, devemos ter uma correção que escala com o logaritmo do tempo na equação para as

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções

alturas.

Até aqui analisamos apenas o modelo RSOS. No entanto, podemos confirmar a consistência dessa discussão introduzindo os demais modelos. De acordo com o que foi dito, como λ do modelo *Single-step* é negativo, devemos ter um aumento na taxa de deposição desse modelo. Isso é confirmado pela figura 5.12(a), que mostra que a altura média do substrato crescente (quadrados) aumenta ligeiramente mais rápido que o caso com tamanho fixo (círculos). Já o modelo de *Etching* possui λ positivo, assim a suavização causada pelas duplicações deve reduzir a taxa de crescimento, o que é confirmado pela figura 5.12(b), onde a altura média do sistema crescente (quadrados) é menor que a do com tamanho fixo (círculos). Dessa forma notamos que a nossa discussão é de fato consistente.

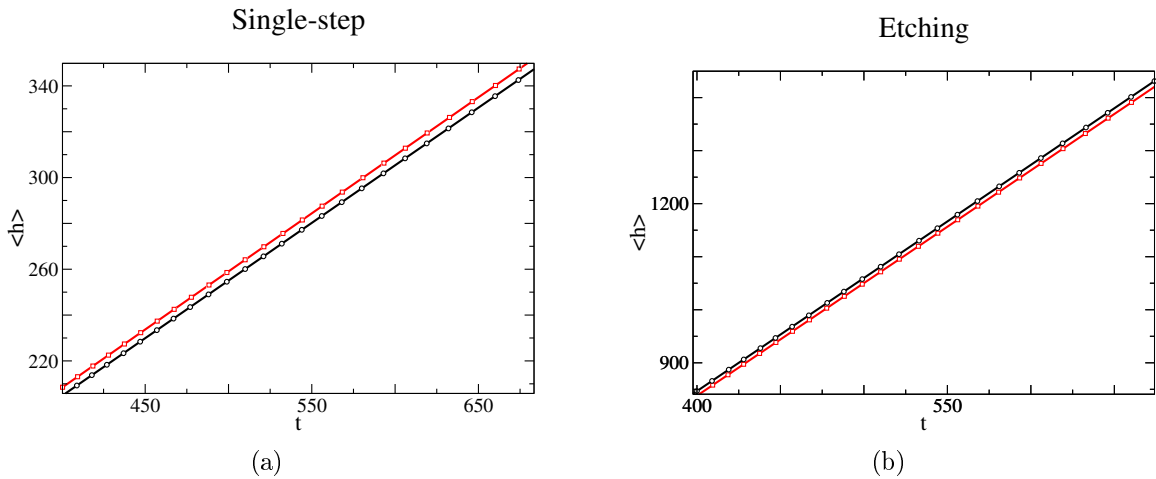


Figura 5.12: Gráfico de evolução da altura média para os modelos (a) *Single-step* e (b) *Etching* com substrato de tamanho fixo, curva preta, e substrato crescendo com velocidade $v_w = 100$, curva vermelha.

Agora que compreendemos os efeitos das duplicações sobre a superfície, vamos considerar o termo $\zeta \ln t$ da equação 5.4. Como estamos discutindo a alteração na taxa de crescimento, vamos analisar a derivada da equação 5.4, que é

$$\frac{\partial \langle h(x, t) \rangle}{\partial t} = v_\infty + \text{sig}(\lambda) \beta \Gamma^\beta t^{\beta-1} \langle \chi \rangle + \zeta t^{-1} \quad . \quad (5.17)$$

Como foi mostrado na seção 5.2, ζ possui sinal positivo para o modelo de *Etching* e sinal negativo para os modelos *Single-step* e RSOS. O que parece contradizer

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções

toda a discussão que fizemos nessa seção. No entanto, as duplicações fazem o termo $\text{sig}(\lambda)(\Gamma t)^\beta \chi_{goe} \rightarrow \text{sig}(\Gamma t)^\beta \chi_{gue}$, sendo $\langle \chi \rangle_{goe} = -0.76007$ e $\langle \chi \rangle_{gue} = -1.77109$. Dessa forma, sendo λ positivo no modelo de *Etching*, esse termo ficará mais negativo quando duplicamos colunas. Como a correção ζ/t tende a zero mais rápido, podemos dizer que esse termo irá amenizar a diferença causada pela mudança da distribuição de GOE para GUE. Para os modelos *Single-step* e RSOS, como tanto λ quanto ζ mudam de sinal, é evidente que a conclusão será análoga.

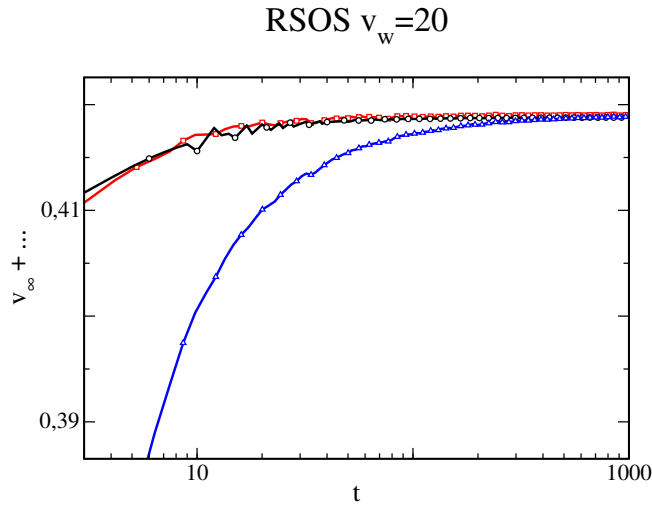


Figura 5.13: Gráfico de $\partial_t \langle h(x, t) \rangle - \text{sig}(\lambda) \beta \Gamma^\beta t^{\beta-1} \langle \chi \rangle_{goe}$ do modelo RSOS em substrato de tamanho fixo (círculos), $\partial_t \langle h(x, t) \rangle - \text{sig}(\lambda) \beta \Gamma^\beta t^{\beta-1} \langle \chi \rangle_{gue}$ (triângulos) e $\partial_t \langle h(x, t) \rangle - \text{sig}(\lambda) \beta \Gamma^\beta t^{\beta-1} \langle \chi \rangle_{gue} - \zeta/t$ (quadrados) no substrato crescendo com $v_w = 20$.

Tentando compreender mais a fundo o papel do termo ζ/t , consideremos um crescimento RSOS em substrato que é plano inicialmente. Nos instantes iniciais, a taxa de deposição não deve ser muito influenciada pelas duplicações, pois praticamente todas as partículas são aceitas, já que existem poucas diferenças de altura na rede. Para tempos grandes teremos a competição entre dois efeitos. Um deles é que quanto maior a rugosidade mais diferenças de alturas teremos na rede, e assim maior seria o efeito das duplicações sobre a taxa de deposição. No entanto, como nosso sistema é crescente, quanto mais o tempo passa maior é o tamanho lateral da superfície, tornando menos relevante o efeito da duplicação de algumas colunas. Assim, apesar de ser mais difícil fazer afirmações para tempos grandes, nos instantes iniciais a dinâmica do sistema

5.3 Efeitos das duplicações e origem das correções

crecente deveria ser similar a do sistema de tamanho fixo, ou seja,

$$\text{sig}(\lambda)\beta\Gamma^\beta t^{\beta-1}\langle\chi\rangle_{goe} \approx \text{sig}(\lambda)\beta\Gamma^\beta t^{\beta-1}\langle\chi\rangle_{gue} + \zeta/t \quad . \quad (5.18)$$

Para verificar se isso é verdade, na figura 5.13 traçamos os gráficos de $\partial_t\langle h(x,t)\rangle - \text{sig}(\lambda)\beta\Gamma^\beta t^{\beta-1}\langle\chi\rangle$ em função do tempo para o caso que cresce (triângulos) e o que não cresce (círculos) usando $\langle\chi\rangle_{gue}$ e $\langle\chi\rangle_{goe}$ respectivamente. A curva vermelha (quadrados) é o caso crescente considerando o termo ζ/t . Analisando a figura notamos que ela corrobora com a aproximação 5.18. Dessa forma, de fato a função do termo ζ/t é amenizar, nos tempos iniciais, a diferença causada pelo substrato crescente seguir a distribuição GUE ao invés da GOE.

Uma possibilidade que poderia ser considerada é que ao invés da $\chi_{goe} \rightarrow \chi_{gue}$, quem sofre uma alteração é o parâmetro Γ indo de $\Gamma \rightarrow \Gamma'$. No entanto, como mostramos na seção 5.2, o Γ se cancela no cálculo da *skewness* e no da curtose da HD. Dessa forma, Γ não poderia ser responsável pela convergência da *skewness* e da curtose para a GUE. Assim concluímos que essa hipótese de que $\Gamma \rightarrow \Gamma'$ substituiria $\chi_{goe} \rightarrow \chi_{gue}$ é falsa.

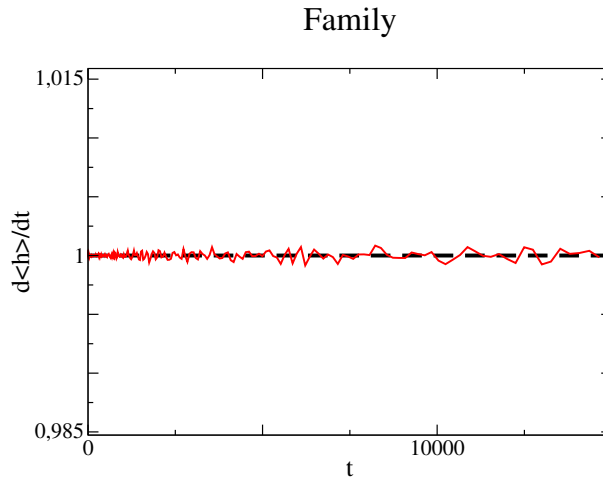


Figura 5.14: Taxa de crescimento da altura média do modelo de Family em substrato com tamanho fixo (linha tracejada) e no crescente (curva sólida).

De acordo com a discussão desenvolvida nessa seção, o crescimento da superfície

5.4 Crossover de GOE para GUE

afeta o $(\vec{\nabla}h)^2$ de forma tal que a distribuição de alturas da interface muda de GOE para GUE. Para finalizar, apresentamos na figura 5.14 o resultado do crescimento lateral de um modelo da classe EW, o modelo de Family, definido na seção 4.3. Nessa figura a curva vermelha (sólida) está relacionada a $\Delta_t\langle h \rangle$ do substrato crescente e a preta (linha tracejada) ao com tamanho fixo. Como nessa classe $(\vec{\nabla}h)^2$ não afeta a dinâmica, as duplicações apenas introduzem flutuações na deriva da altura média, sem alterar globalmente a evolução da altura média. Como já foi discutido, essas flutuações vêm das colunas acrescentadas não possuem altura igual à altura média.

5.4 Crossover de GOE para GUE

Nos resultados da seção anterior, utilizamos o tamanho inicial do substrato igual ao número de colunas que eram duplicadas por unidade de tempo, como foi explicado na seção 4.1. Se estudamos a *skewness* e a *curtose* para diferentes tamanhos iniciais, notamos que sua dinâmica depende desse parâmetro. Na figura 5.15(a) mostramos o gráfico da *skewness* e na 5.15(b) o da *curtose* para diferentes tamanhos iniciais. No eixo das abscissas, o tempo foi trocado pelo tamanho da interface dividido pelo tamanho inicial, sendo $L = L_0 + v_w t$. Analisando essas curvas, podemos ver que para $L_0 \gg v_w$, as distribuições de alturas inicialmente se aproximam da GOE e depois tendem assintoticamente para a GUE. Essas distribuições tenderem para a GOE inicialmente era de certa forma esperado, pois em um substrato muito grande a duplicação de algumas colunas deve ter um efeito inicial pequeno sobre a média e demais cumulantes da distribuição. Porém, é interessante que mesmo para tamanhos iniciais muito grandes essas distribuições tendam assintoticamente para a GUE em tempos longos.

Os gráficos 5.15(a) e 5.15(b) mostram que as curvas param de se aproximar de GOE e começam a se dirigir para GUE em $L_c/L_0 \sim 2$, onde L_c é o tamanho de *crossover*. Sendo, $L_c = L_0 + v_w t_c$, temos que o tempo de *crossover* escala com $t_c \sim L_0/v_w$. Assim, podemos minimizar esse tempo de *crossover* fazendo $L_0 = v_w$. Utilizar tamanhos menores faria com que na primeira unidade de tempo a probabilidade de duplicar fosse maior que a de depositar. Assim, haveriam diversas duplicações de

5.4 Crossover de GOE para GUE

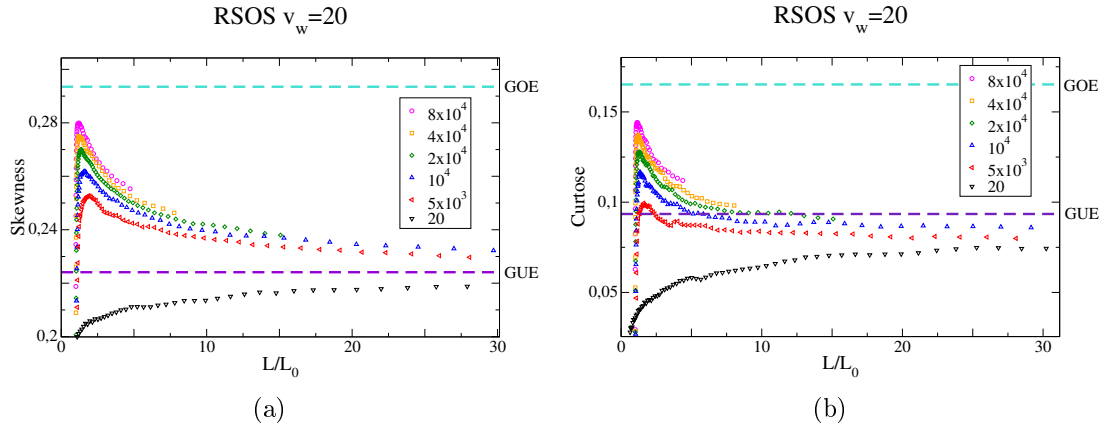


Figura 5.15: Gráfico da (a) *skewness* e da (b) *curtose* para diferentes tamanhos iniciais. A curva para $L_0 = 20$ em função de L/L_0 não ficaria visível nessa escala, por isso ela está em função de $t/640$ nos dois gráficos.

colunas iguais e, no final dessa primeira unidade de tempo, teríamos um substrato com tamanho da ordem de v_w com poucas partículas depositadas, o que daria praticamente no mesmo que iniciar com v_w sítios. Dessa forma, se utilizamos $L_0 = v_w$, minimizamos o tempo de *crossover*, fazendo ele ser da ordem de uma unidade de tempo.

Analisando mais a fundo a figura 5.15(b), notamos que as curvas de $L_0 = 5 \times 10^3$, 10^4 e 2×10^4 atravessam o valor da GUE, dando a impressão que as curtoses vão convergir para um valor menor que o da GUE. No entanto, na seção 5.2, nós mostramos que a curva para $L_0 = 20$ converge para a GUE no regime assintótico. Assim, como a convergência desse cumulante exige um tempo muito maior que o tempo de *crossover*, as curvas $L_0 = 5 \times 10^3$, 10^4 e 2×10^4 devem se aproximar da com $L_0 = 20$ e elas devem convergir juntas para a GUE.

Capítulo 6

Resultados em duas dimensões

Neste capítulo vamos apresentar os resultados obtidos para substratos crescentes em duas dimensões. Porém, como vimos no capítulo anterior, as análises dos resultados dependem dos parâmetros não universais. Como alguns dos parâmetros que vamos utilizar ainda não foram obtidos na literatura, na primeira seção vamos apresentar os cálculos destes em duas dimensões. Em seguida, vamos estudar os expoentes de crescimento dos domínios crescentes bidimensionais. Feito isso, iremos apresentar nossos resultados para a distribuição de alturas. Como essas distribuições não foram calculadas analiticamente em duas dimensões, nós vamos utilizar nossos resultados para estimar precisamente seus cumulantes. Nós também determinamos as correções em duas dimensões. Para finalizar, vamos mostrar como as discussões da seção 5.3 se estendem para o caso bidimensional.

Todos os modelos foram estudados com cada lado crescendo com velocidades $v_w = 2, 4, 6$ e 10 . Crescemos entre vinte mil e trinta mil amostras para cada velocidade.

6.1 Parâmetros não universais

Quando calculamos as correções no capítulo anterior, fizemos uso dos parâmetros não universais v_∞ e Γ . Os valores de v_∞ dos modelos que estudamos já foram calculados, em duas dimensões, no trabalho [35]. Esses valores podem ser obtidos da mesma forma que foi feito em uma dimensão (seção 4.2.2). No entanto, os valores de Γ em duas

6.1 Parâmetros não universais

dimensões são mais difíceis de se obter, pois nesse caso não conhecemos exatamente a distribuição da variável χ e, assim, a equação 5.1 só nos permite obter os produtos $\Gamma^{n\beta} \langle \chi^n \rangle_c$.

Nesta seção, vamos apresentar os resultados de diversas simulações que foram necessárias para o cálculo de Γ , em todas elas o substrato não cresce lateralmente com o tempo.

Para calcular os valores de Γ nós seguimos o mesmo procedimento utilizado em [26] (explicações mais profundas sobre as equações que vamos utilizar podem ser encontradas em [63,64,66]). O valor de Γ pode ser calculado pela seguinte equação

$$\Gamma = A^{1/\alpha} \lambda \quad , \quad (6.1)$$

onde λ é o coeficiente do termo não-linear da equação KPZ (2.30), A é a amplitude das correlações altura-altura no espaço de Fourier $\langle |h(\vec{k})|^2 \rangle = Ak^{2-2\alpha}$. Dessa forma, para calcular os valores de Γ , precisamos primeiro obter esses outros parâmetros.

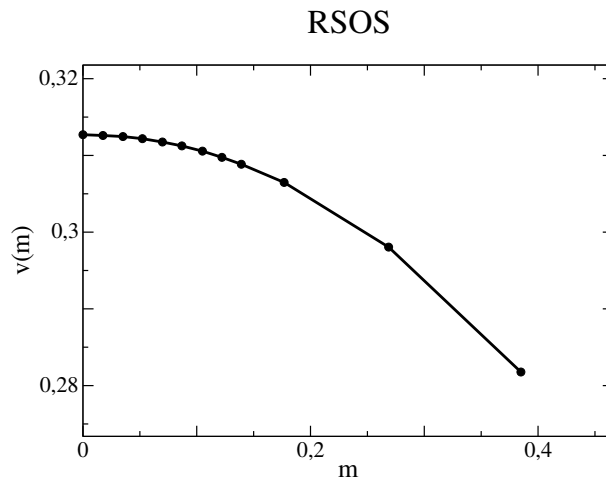


Figura 6.1: Gráfico da velocidade de crescimento em função da inclinação do substrato para o modelo RSOS com $L = 2048$.

O λ pode ser calculado manipulando o efeito do termo não linear da equação KPZ [6,65]. Se tiramos a média dessa equação no referencial estático do substrato

6.1 Parâmetros não universais

temos

$$v = F + \frac{\lambda}{2L} \int_0^L d^2x (\vec{\nabla}h)^2 \quad , \quad (6.2)$$

onde chamamos $\langle \partial_t h \rangle = v$ e F é o fluxo médio de partículas por sítio. Como já foi discutido diversas vezes, o termo não linear é responsável por um crescimento normal à superfície e a intensidade desse efeito é mensurada por λ . Dessa forma, se inserirmos artificialmente uma inclinação global no substrato $\langle \vec{\nabla}h \rangle = m$, a velocidade de crescimento deve ser alterada. De acordo com 6.2, teremos

$$v(m) = v(0) + \frac{\lambda}{2} m^2 \quad . \quad (6.3)$$

Assim, podemos ajustar uma parábola à curva de $v(m)$ por m para obter o valor de λ . Na figura 6.1 mostramos um gráfico da velocidade de crescimento em função da inclinação para o modelo RSOS. O valor de $v(m)$ é calculado da mesma forma que foi obtido o v_∞ do modelo de *Etching* na seção 4.2.2.

Para calcular o valor de A vamos utilizar o efeito de tamanho finito na velocidade de crescimento. Como fica evidente na figura 6.2(a), essa velocidade alcança um valor limitante que depende do tamanho do sistema. De acordo com [66], esse efeito de tamanho finito segue a seguinte equação

$$\Delta v = v(L) - v_\infty = -\frac{A\lambda}{2L^{2-2\alpha}} \quad . \quad (6.4)$$

Conhecendo o valor de λ podemos utilizar essa equação para determinar o valor de A . Na figura 6.2(b) apresentamos uma gráfico de Δv por $1/L^{2-2\alpha}$. Escalando o eixo das abscissas dessa maneira, obtemos uma reta de coeficiente angular $-\lambda A/2$. Então, utilizando o valor de λ estimado acima, obtemos o valor de A .

De posse dos valores de A e λ podemos calcular o valor de Γ para cada modelo. Apresentamos os valores desses parâmetros na tabela 6.1. Os erros foram propagados utilizando o método da derivada. Para o modelo RSOS, esses parâmetros já haviam sido calculados em [26], onde foi encontrado $\lambda = -0,414$, $A = 1,2005$ e $\Gamma = 0,66144$. Do nossos resultados, λ é o único que não é consistente com o valor obtido em [26],

6.2 Expoente de crescimento

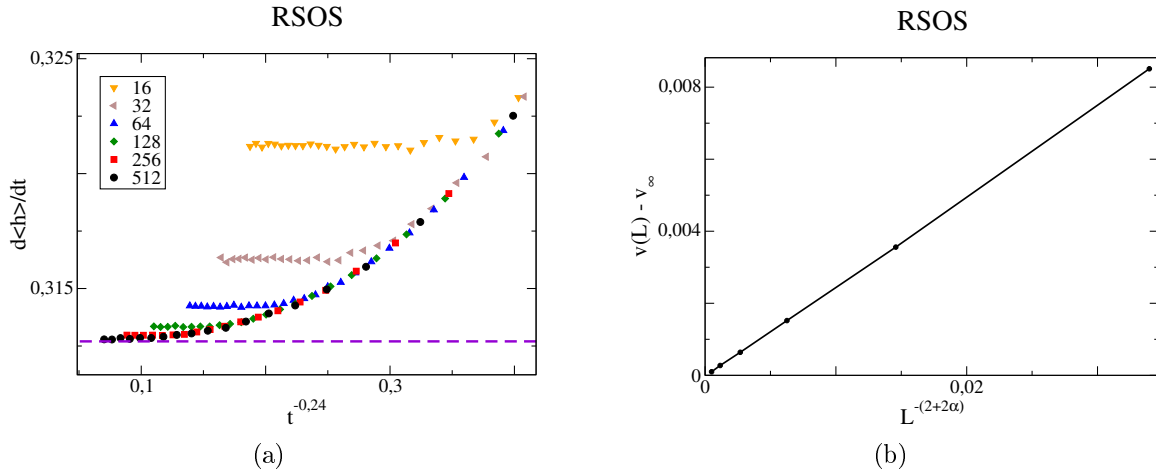


Figura 6.2: (a) Velocidade de crescimento para diferentes tamanhos de sistema. A linha tracejada é o valor de v_{∞} . (b) Gráfico de Δv em função de $1/L^{2-2\alpha}$. O coeficiente angular dessa reta é igual a $-\lambda A/2$.

no entanto, se o autor tivesse calculado as barras de erro, provavelmente os resultados teriam alguma sobreposição.

Vale ressaltar que esse parâmetros foram calculados em sistemas que não crescem. Deles utilizaremos apenas o Γ .

	v_{∞}	λ	A	Γ
RSOS	0.31270(1)	-0,405(7)	1,22(4)	0,68(6)
<i>Etching</i>	3.3340(1)	2,147(4)	3,629(9)	58,5(5)
<i>Single-step</i>	0.341368(3)	-0,481(3)	1,44(5)	1,2(1)

Tabela 6.1: Valores de alguns dos parâmetros não universais dos modelos RSOS, *Etching* e *Single-step*. Os valores de v_{∞} foram extraídos de [28].

6.2 Expoente de crescimento

Da mesma forma que foi feito no capítulo anterior, vamos analisar a convergência do expoente de crescimento para verificar se o crescimento lateral afeta a classe de universalidade da interface. Nas figuras 6.3(a), 6.3(b) e 6.3(c) apresentamos esses resultados para os modelos *Single-step*, *Etching* e RSOS respectivamente. Como ocorre em uma dimensão, a convergência do expoente depende da velocidade lateral. Para cada velocidade, o substrato tem um tamanho diferente em um mesmo instante de

6.3 Distribuição de altura

tempo. Assim, como esse expoente sofre efeitos de tamanho finito, é natural que a convergência desse expoente dependa da velocidade. Além disso, assim como em uma dimensão, devem existir correções de ordem superior que dependem da velocidade de crescimento lateral. Os gráficos mostram que os expoentes tendem para um valor próximo de $\beta \approx 0,24$ da classe KPZ. Nesse caso, como o sistema cresce com o quadrado do tempo, torna-se inviável alcançar tempos muito grandes, por isso, nessa dimensionalidade, para alguns v_w 's, os expoentes se encontram longe do esperado mesmo nos maiores tempos simulados. Podemos notar que para o modelo de *Etching*, esses expoentes se encontram mais distantes que nos outros modelos, o que ocorre porque esse modelo sofre mais efeitos de tamanho finito que os demais.

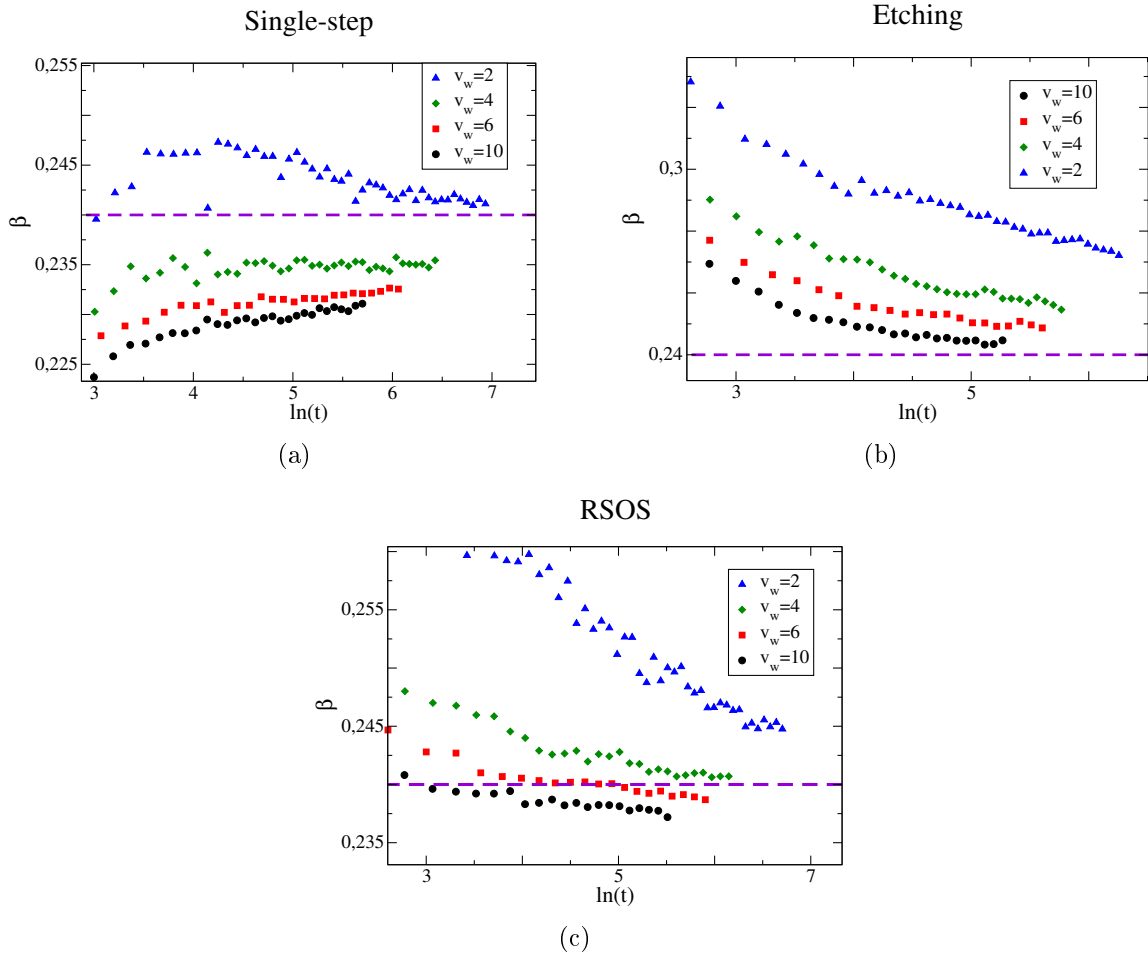


Figura 6.3: Expoente de crescimento em função do tempo para diferentes velocidades dos modelos (a) *Single-step*, (b) *Etching* e (c) RSOS. A linha tracejada representa o valor $\beta = 0,24$, que é o valor do expoente da classe KPZ em duas dimensões.

6.3 Distribuições de alturas

Analisando as distribuições de alturas nessa dimensionalidade, notamos que assim como em uma dimensão, os cumulantes da HD's dos domínios crescentes tendem para valores próximos dos resultados numéricos relacionados à interfaces curvas. Como não existem resultados analíticos sobre a distribuição de χ em duas dimensões, nós tentamos estimar numericamente os cumulantes dessa distribuição com base em nossos resultados. A estimativa da *skewness* e da curtose foi feita traçando o gráfico dessas grandezas em função de $t^{-2\beta}$ e extrapolando para $t \rightarrow \infty$. Nas figuras 6.4(a) e 6.4(b) ilustramos essas extrapolações para a *skewness* e a curtose do modelo *Single-step*. Tirando uma média das extrapolações em diferentes velocidades, calculamos o valor da *skewness* e da curtose da distribuição correspondente a cada modelo. Na tabela 6.2 mostramos esses resultados, as barras de erro foram estimadas pelo desvio padrão dos resultados das extrapolações para diferentes velocidades.

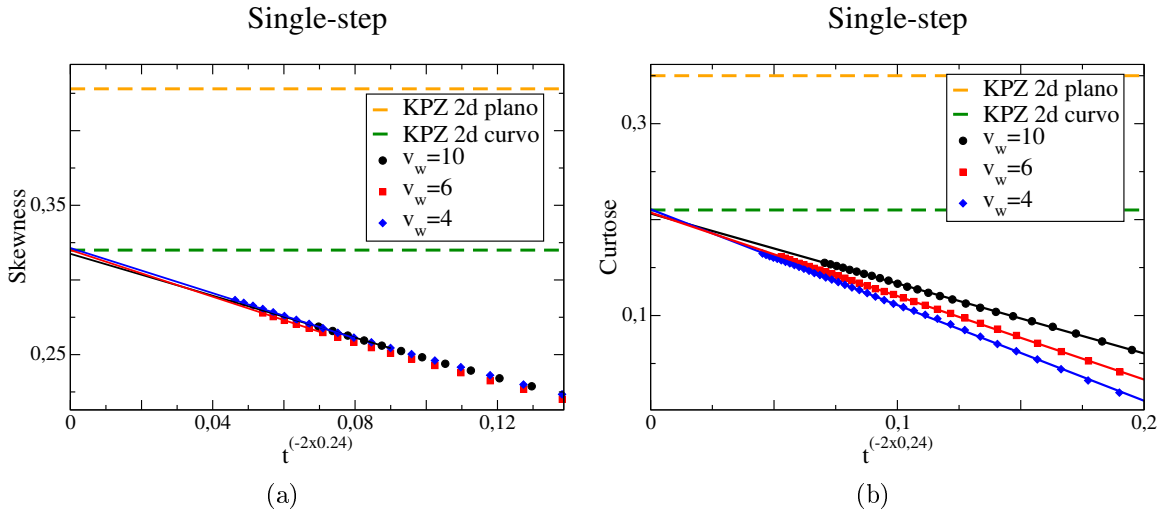


Figura 6.4: Estimativa da (a) *skewness* e da (b) curtose da distribuição de alturas usando o modelo *Single-step*.

Para analisar a média da distribuição, como não sabemos exatamente o valor de $\langle \chi \rangle$ em duas dimensões, nós inicialmente consideramos o produto $\Gamma^\beta \langle \chi \rangle = g_1$. Para

6.3 Distribuição de altura

estimar esse produto nós derivamos a equação 2.34 e a manipulamos para obter

$$\frac{\partial_t \langle h \rangle - v_\infty}{\beta} = \text{sig}(\lambda) \Gamma^\beta \langle \chi \rangle t^{\beta-1} \quad . \quad (6.5)$$

Dessa forma, se traçamos um gráfico de $(\partial_t \langle h \rangle - v_\infty)/\beta$ em função de $t^{\beta-1}$ devemos obter uma reta com coeficiente angular $g_1 = \Gamma^\beta \langle \chi \rangle$. No entanto, como podemos ver na curva com círculos da figura 6.5(a), não obtemos uma boa reta, o que nos indica que em duas dimensões também existem correções fortes. Porém, para obter essas correções precisamos do valor de g_1 , como foi feito na seção 5.2, o que nos deixa em um impasse.

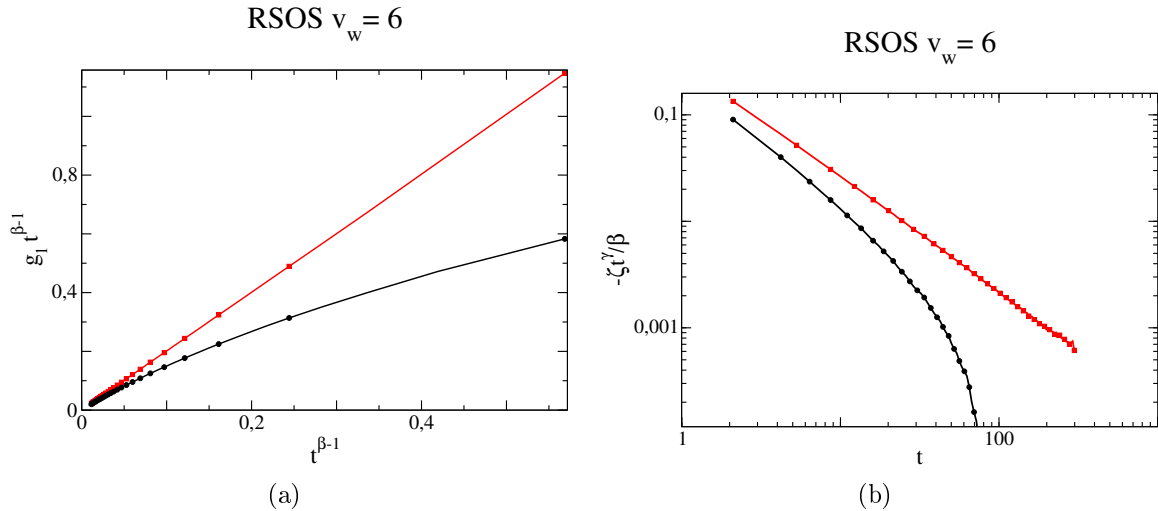


Figura 6.5: (a) Gráficos para o cálculo do valor de g_1 . A curva com quadrados foi traçada sem considerar nenhuma correção e a com círculos após cinco passos da iteração. (b) Gráficos para a determinação da correção. A curva com quadrados foi traçada considerando o primeiro g_1 calculado e a com círculos utilizando o valor final de g_1 .

A solução que encontramos para esse problema foi utilizar um método auto-consistente. Nós ajustamos uma reta na região de $t \rightarrow \infty$ do gráfico 6.5(a), e obtemos um valor provisório para g_1 , utilizando esse valor nós calculamos a correção $\zeta t^{-\gamma}$. Como o valor de g_1 não é o correto, naturalmente a curva da correção também não apresenta uma lei de potência bem definida, como mostramos na curva de pontos circulares da figura 6.5(b). Mesmo assim, nós estimamos uma forma provisória para a correção ajustando uma lei de potência em tempos pequenos. Em seguida, utilizamos essa correção para calcular um novo valor de g_1 . Com esse novo valor, recalculamos

6.3 Distribuição de altura

a correção. Continuamos calculando essas quantidades até elas pararem de variar significativamente nas iterações. Para as velocidades que estudamos, aproximadamente cinco passos foram o suficientes para esses valores convergirem. Nos gráficos 6.5(a) e 6.5(b), mostramos a curva final de g_1 e da correção, ambas são representadas pelas curvas com pontos quadrados. Note como de fato o gráfico de 6.5(a) (quadrados) possui uma boa reta e 6.5(b) (quadrados) segue uma lei de potência bem definida após as iterações, que assim como em uma dimensão é aproximadamente t^{-1} .

Em duas dimensões, obtivemos novamente uma correção do tipo $\zeta \ln t$ em h (eq. 5.1). Nos gráficos das figuras 6.6(a), 6.6(b) e 6.6(c), nós mostramos que, assim como em uma dimensão, ζ não varia significativamente com a velocidade lateral para nenhum dos modelos. Além disso, essa correção não aparece na variância, por isso estamos considerando que ζ é uma variável determinística.

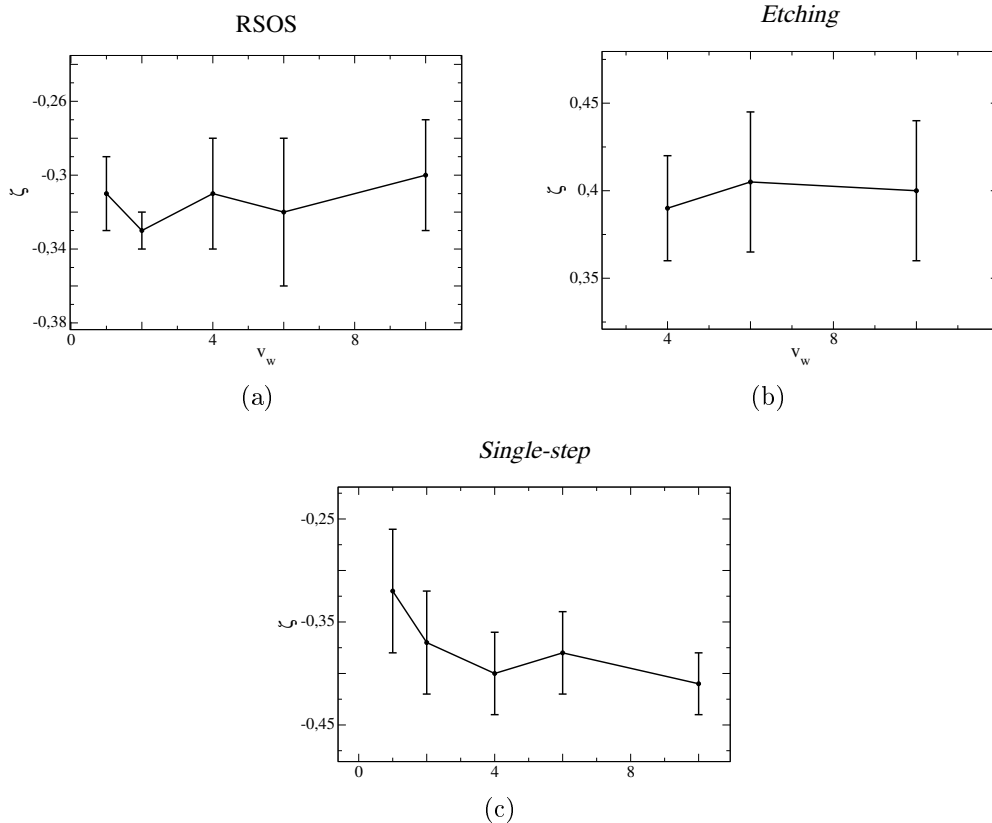


Figura 6.6: Gráficos de ζ para as diferentes velocidades dos modelos (a) RSOS, (b) *Etching* e (c) *Single-step*.

Nos gráficos para o modelo de *Etching* não colocamos os resultados correspon-

6.3 Distribuição de altura

dentos às velocidades $v_w = 1$ e 2 , isso porque, como mostrado na figura 6.7(a), as correções $\zeta \ln t$ e as de ordem superior, que nós desconsideramos até aqui, parecem competir fazendo a curva em 6.7(a) cruzar o zero diversas vezes. Esse problema acontece mesmo se utilizarmos o valor final de g_1 obtido com outras velocidades. Esse efeito nos impediu de calcular o valor de ζ e $\langle \eta \rangle$ para essas velocidades. Podemos notar que, de fato, as correções ficam pequenas nessas velocidades quando tentamos calcular os valores de g_1 . Na figura 6.7(b), mostramos o gráfico desse cálculo para $v_w = 2$ (círculos) e $v_w = 6$ (quadrados) sem considerar nenhuma correção. Nessa figura notamos que o gráfico para $v_w = 2$ fica bem mais linear que o para $v_w = 6$. Como as correções são pequenas nas velocidades $v_w = 1$ e 2 , não tivemos problemas para calcular a média da distribuição sem considerá-las.

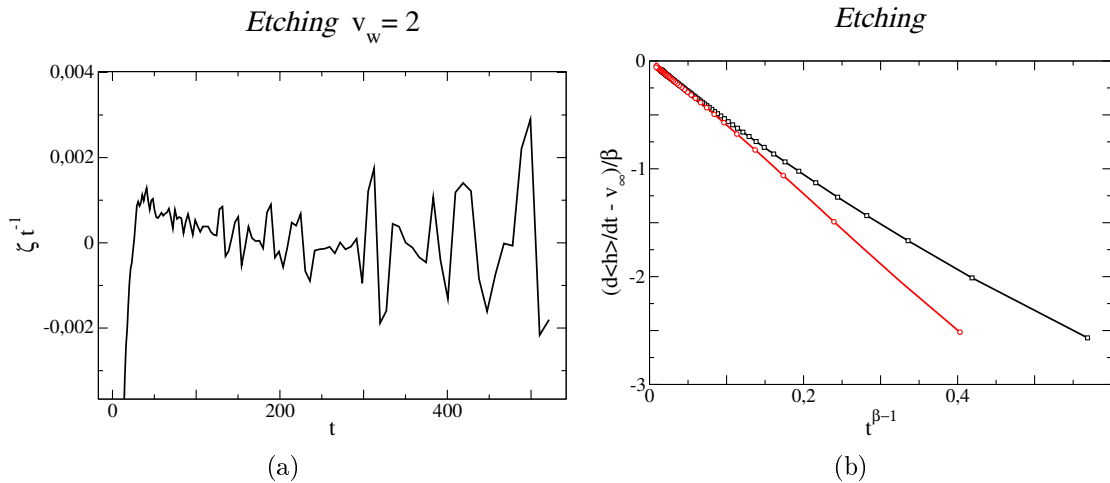


Figura 6.7: (a) Gráfico que mostra a impossibilidade de se calcular ζ para a velocidade $v_w = 2$. (b) Curva de $g_1 t^{\beta-1}$ para as velocidades $v_w = 2$ (círculos) e $v_w = 6$ (quadrados).

Nós também calculamos o desvio $\langle \eta \rangle$ da distribuição. Isso foi feito de maneira análoga ao caso unidimensional, descrito na seção 5.2. Assim como em uma dimensão, esses valores não variam significativamente com a velocidade. Novamente, não sabemos se η é determinístico ou estocástico. Se essa grandeza for estocástica, o cálculo que nós realizamos determina apenas o valor médio dessa variável.

Sabendo o valor de Γ , nós calculamos o valor de $\langle \chi \rangle$ usando os resultados para g_1 . Esses valores estão dispostos na tabela 6.2. Novamente foi tirada a média e o desvio padrão para as diferentes velocidades em um mesmo modelo.

6.3 Distribuição de altura

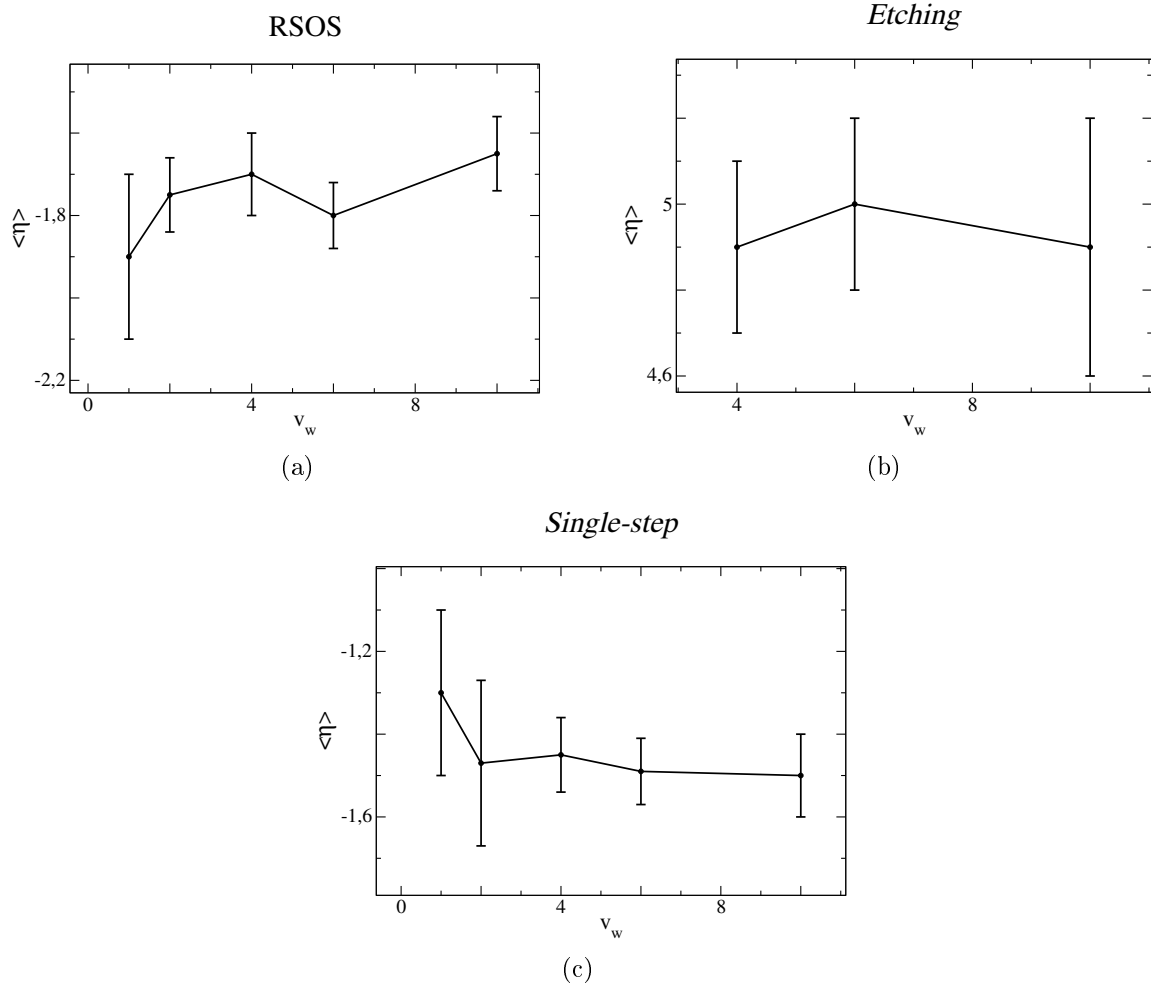


Figura 6.8: Gráficos de $\langle \eta \rangle$ para as diferentes velocidades dos modelos (a) RSOS, (b) *Etching* e (c) *Single-step*.

De posse das correções, podemos calcular também a razão $R = \langle \chi \rangle_c / \langle \chi^2 \rangle_c^{0,5}$. Essa estimativa foi feita da mesma forma que a *skewness* e a *curtose*, porém utilizando $t^{-\beta}$ para a extrapolação. Os resultados estão na tabela 6.2.

Analisando a tabela 6.2, notamos que os nossos resultados estão de acordo com os obtidos em [27,28] para a geometria curva da classe KPZ em duas dimensões. Analisando a margem em que os resultados de [27] variam, notamos que a $\langle \chi \rangle_c$ varia entre $-2,22$ e $-2,41$, $\langle \chi^2 \rangle_c$ entre $0,304$ e $0,377$, R entre $3,86$ e $4,09$, a *Skewness* entre $0,303$ e $0,348$ e a *curtose* entre $0,201$ e $0,230$. Já em [28], existem resultados para dois modelos em geometria curva, os valores de *Skewness* encontrados foram $0,32$ e $0,339$ e os de *curtose* $0,21$ e $0,20$. Comparando os resultados anteriores com os da

6.4 Comparação com o caso unidimensional

	$\langle \chi \rangle_c$	$\langle \chi^2 \rangle_c$	R	$Skewness$	$Curtose$
RSOS	-2,23(9)	0,338(3)	3,94(4)	0,328(4)	0,210(4)
<i>Etching</i>	-2,31(9)	0,342(8)	3,9(1)	0,336(6)	0,21(1)
<i>Single-step</i>	-2,28(6)	0,334(5)	4,07(4)	0,329(7)	0,206(3)

Tabela 6.2: Média, variância, R , módulo da $Skewness$ e a $Curtose$ da distribuição de alturas dos domínios crescentes em duas dimensões. Esses valores foram calculados tirando a média do resultado para as diferentes velocidades.

tabela 6.2, notamos que nossos resultados para os diferentes modelos variam dentro de uma margem menor que os estimados em [27] e em [28]. Dessa forma, utilizando esses modelos discretos de geometria plana em substratos crescentes, nós conseguimos estimar os cumulantes da distribuição curva bidimensional da classe KPZ de maneira mais precisa que os resultados da literatura obtidos utilizando interfaces com curvatura.

6.4 Comparação com o caso unidimensional

Como foi mostrado nesse capítulo, as distribuições de alturas dos domínios crescentes em duas dimensões também convergem para o caso curvo. Além disso, elas também possuem uma correção logarítmica.

É evidente que em duas dimensões as duplicações também afetarão o termo $\langle (\vec{\nabla} h)^2 \rangle$, suavizando a superfície. Assim, a discussão relacionada aos efeitos das duplicações, realizada na seção 5.3, também é válida no caso bidimensional.

Um cálculo análogo ao feito na seção 5.3 pode ser utilizado para mostrar a origem da correção logarítmica. Sabendo que o número de sítios em duas dimensões é $L_1 L_2$ e que $v_w(L_1 + L_2)$ sítios são adicionados, em média, em uma unidade de tempo, podemos fazer as mesmas considerações e no lugar da equação 5.14 obter

$$\frac{K}{L_1 L_2 + v_w(L_1 + L_2)} = \frac{K}{L_1 L_2} \left(1 - \frac{v_w(L_1 + L_2)}{L_1 L_2} \right) . \quad (6.6)$$

Como $L_1 \approx L_2 \approx v_w t$, se $t \gg 1$, temos

$$\frac{v_w(L_1 + L_2)}{L_1 L_2} \approx \frac{2v_w^2 t}{v_w^2 t^2} \sim t^{-1} . \quad (6.7)$$

6.4 Comparação com o caso unidimensional

Se continuarmos o cálculo, também vamos chegar a

$$\frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} = \frac{\lambda}{2} \langle (\vec{\nabla} h)^2 \rangle^G \approx \frac{\lambda}{2} \langle (\vec{\nabla} h)^2 \rangle^F - \frac{\lambda \mu}{t} \quad . \quad (6.8)$$

Assim, em duas dimensões também devemos ter uma correção que escala com o logaritmo do tempo na equação para as alturas (eq. 5.1).

Na verdade, é evidente que o termo $\zeta \ln t$ deve aparecer em qualquer dimensionalidade. Tanto na eq. 5.14 quanto em 6.6, na fração dentro do parêntese do lado direito da equação, temos o número de colunas adicionadas em uma unidade de tempo dividido pelo tamanho do sistema, ou seja, a taxa de crescimento lateral do sistema dividida pelo tamanho do sistema. Em um sistema d dimensional, o número de sítios escala com t^d e, assim, a taxa de crescimento escala com t^{d-1} . Dessa forma é natural que a fração dessas grandezas escale com t^{-1} em qualquer dimensionalidade.

Capítulo 7

Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação abordamos de forma detalhada a dinâmica de interfaces em substratos que crescem lateralmente. Como esses sistemas planos que crescem lateralmente têm sido usados como uma aproximação para interfaces curvas [19,20], o objetivo principal do nosso trabalho foi determinar se esse tipo de sistema é uma boa aproximação para interfaces curvas.

Nós propusemos um modelo completamente estocástico para implementar deposições em substratos que crescem lateralmente. Com esse modelo nós crescemos interfaces em uma e duas dimensões.

Estudando modelos discretos da classe KPZ nesses domínios crescentes, mostramos que a distribuição de altura desses sistemas tende assintoticamente para a distribuição correspondente a interfaces curvas, tanto em uma quanto em duas dimensões. Além disso, estimamos de maneira razoavelmente precisa os primeiros cumulantes da distribuição da variável χ correspondente a interfaces curvas bidimensionais. Esses resultados mostram que a curvatura global não é essencial para a produção de interfaces com distribuições de alturas que são associadas a crescimentos curvos.

Estudando os efeitos do crescimento lateral da interface, nós mostramos que se esse crescimento é realizado suavizando a interface, essa suavização afeta o termo não linear $(\vec{\nabla}h)^2$ da equação KPZ. Um dos efeitos desse fenômeno é alterar a taxa de crescimento das alturas, fazendo o termo $(\Gamma t)^\beta \langle \chi \rangle_{goe} + \eta \rightarrow (\Gamma t)^\beta \langle \chi \rangle_{gue} + \eta' + \zeta \ln t$ da equação 2.30. Além disso, mostramos analiticamente que um termo $\zeta \ln t$ deve

Conclusões e Perspectivas

aparecer nesses sistemas que crescem lateralmente.

Analisamos em detalhes as correções envolvidas na dinâmica desses sistemas crescentes em uma e duas dimensões. Calculamos o desvio $\langle \eta \rangle$ da distribuição e o valor de ζ da correção $\zeta \ln t$ que aparecem nesses sistemas. Notamos que essas correções não dependem de forma significativa da velocidade de crescimento lateral. No entanto, ressaltamos que devem haver correções de ordem maior que, além de estocásticas, devem depender da velocidade de aumento do substrato.

Mostramos também que, em uma dimensão, se o tamanho inicial for grande, a distribuição de altura tende inicialmente para GOE. No entanto, mesmo se esse tamanho inicial for muito grande, após esse transiente inicial onde a HD tende para GOE, a distribuição de alturas converge assintoticamente para GUE.

Temos como perspectivas futuras aplicar o nosso modelo a crescimentos da classe KPZ em dimensões superiores. Talvez seja possível estimar com precisão os primeiros cumulantes das distribuições de alturas das interfaces curvas em três ou mais dimensões.

Outra possibilidade seria utilizar o modelo proposto em crescimentos de outras classes de universalidade não lineares, por exemplo, a classe Villain–Lai–Das Sarma (VLDS). Dessa forma, vamos poder identificar se existe alguma diferença entre as distribuições dos sistemas de substrato crescente e os de tamanho fixo. Se houver, podemos tentar calcular numericamente essa distribuição relacionada aos substratos crescentes e, possivelmente, concluir que ela esteja relacionada a interfaces curvas da respectiva classe de universalidade.

Apêndice A

Limite gaussiano da distribuição binomial

Considerando a distribuição

$$p(h) = \frac{N!}{h!(N-h)!} \left(\frac{1}{L}\right)^h \left(\frac{L-1}{L}\right)^{N-h}, \quad (\text{A.1})$$

no regime em que $N \rightarrow \infty$ as alturas também são muito grandes. Assim, apesar das alturas variarem discretamente, $\Delta h = 1$ é uma variação muito pequena quando comparada à h , por isso podemos considerar que $p(h)$ é uma função contínua de h .

Para lidar com os fatoriais nesse regime assintótico é conveniente aplicar o logaritmo dos dois lados de A.1, o que resulta em

$$\ln p(h) = \ln N! - \ln h! - \ln(N-h)! + h \ln\left(\frac{1}{L}\right) + (N-h) \ln\left(\frac{L-1}{L}\right) \quad (\text{A.2})$$

Podemos eliminar os fatoriais utilizando a expansão assintótica de Stirling.¹

$$\ln N! = N \ln N - N + O(\ln N) \quad (\text{A.3})$$

¹A dedução dessa expansão pode ser encontrada em [67].

Limite gaussiano da distribuição binomial

Usando essa formula em A.2 temos

$$\ln p(h) = N \ln N - h \ln h - (N-h) \ln(N-h) + h \ln \left(\frac{1}{2}\right) + (N-h) \ln \left(\frac{L-1}{L}\right) . \quad (\text{A.4})$$

Para obtermos o limite gaussiano da distribuição binomial vamos expandir esse logaritmo em torno de seu valor máximo, que coincide com o valor máximo de $p(h)$ pois o logaritmo é uma função monotonicamente crescente. Sendo

$$\frac{\partial \ln p(h)}{\partial h} = -\ln h + \ln(N-h) + \ln \left(\frac{1}{2}\right) - \ln \left(\frac{L-1}{L}\right) , \quad (\text{A.5})$$

nos pontos críticos temos

$$\ln(N-h_m) - \ln h_m + \ln \left(\frac{1}{2}\right) - \ln \left(\frac{L-1}{L}\right) = 0 , \quad (\text{A.6})$$

$$\ln \left(\frac{N-h_m}{h_m}\right) = \ln(L-1) \Rightarrow h_m = \frac{N}{L} . \quad (\text{A.7})$$

Para determinar se esse ponto crítico é um máximo fazemos

$$\frac{\partial^2 \ln p(h)}{\partial h^2} \Bigg|_{h=h_m} = -\frac{1}{h+m} - \frac{1}{N-h_m} < 0 , \quad (\text{A.8})$$

assim h_m é de fato um máximo.

Como N é o número total de partículas depositadas, temos que $N = \sum_{i=0}^L h_i$, assim

$$h_m = \frac{N}{L} = \frac{1}{L} \sum_{i=0}^L h_i = \bar{h} . \quad (\text{A.9})$$

Logo o máximo coincide com a média, como em uma distribuição gaussiana.

Agora vamos expandir $\ln p(h)$ em série de Taylor em torno do máximo,

$$\ln p(h) = \ln p(h_m) + \frac{\partial \ln p(h)}{\partial h} \Bigg|_{h=h_m} (h-h_m) + \frac{\partial^2 \ln p(h)}{\partial h^2} \Bigg|_{h=h_m} \frac{(h-h_m)^2}{2} + \dots . \quad (\text{A.10})$$

Limite gaussiano da distribuição binomial

No máximo a derivada primeira se anula e ficamos com

$$\ln p(h) = \ln p(h_m) - \frac{L^2}{2N(L-1)}(h - h_m)^2 . \quad (\text{A.11})$$

Descartando os termos de ordem maior temos

$$p(h) = C \exp\left(\frac{-L^2}{2N(L-1)}(h - h_m)^2\right) . \quad (\text{A.12})$$

Trocamos $p(h_m)$ por C porque as diversas aproximações que fizemos nos obrigam a renormalizar a distribuição. Dessa forma, calculamos

$$\int_{-\infty}^{\infty} C \exp\left(\frac{-L^2}{2N(L-1)}(h - h_m)^2\right) dh = \sqrt{\pi \frac{2N(L-1)}{L^2}} , \quad (\text{A.13})$$

que implica em $C = L/\sqrt{2\pi N(L-1)}$. Dessa forma a distribuição no limite assintótico se torna

$$p_{RD}(h) = \sqrt{\frac{L}{2\pi t(L-1)}} \exp\left(\frac{-L}{2t(L-1)}(h - h_m)^2\right) , \quad (\text{A.14})$$

onde usamos que $N = Lt$. Se consideramos que o sistema é muito grande teremos

$$p_{RD}(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left(\frac{-(h - t)^2}{2t}\right) , \quad (\text{A.15})$$

onde utilizamos que $\langle h \rangle = N/L = t$

Apêndice B

Uma propriedade simples de funções periódicas

Considere uma função suave $h(x)$, definida em um intervalo de comprimento L e que satisfaça condições de contorno periódicas tais que $h(x) = h(x + L)$. Podemos derivar essa condição diversas vezes e concluir que, para qualquer valor de n , a seguinte equação é válida:

$$\frac{d^n h(x)}{dx^n} = \frac{d^n h(x + L)}{dx^n} . \quad (\text{B.1})$$

Podemos mostrar que a média $\langle \frac{d^n h}{dx^n} \rangle$ é nula fazendo

$$\left\langle \frac{d^n h}{dx^n} \right\rangle = \frac{1}{L} \int_a^{a+L} \frac{d^n h}{dx^n} dx = \frac{1}{L} \left(\frac{d^{n-1} h}{dx^{n-1}} \Big|_{a+L} - \frac{d^{n-1} h}{dx^{n-1}} \Big|_a \right) , \quad (\text{B.2})$$

que de acordo com B.1 é igual a zero.

Referências Bibliográficas

- [1] J. Zhang, Y. C. Zhang, P. Alstrom, M. T. Levinsen; “*Modeling forest fire by a paper-burning experiment, a realization of the interface growth mechanism*”; Physica A **189**, 383–389 (1992).
- [2] A. M. Miranda, I. L. Menezes-Sobrinho, M. S. Couto; “*Spontaneous Imbibition Experiment in Newspaper Sheets*”; Physical Review Letters **104**, 086101 (2010).
- [3] F. S. Nascimento, S. C. Ferreira, S. O. Ferreira; “*Faceted anomalous scaling in the epitaxial growth of semiconductor films*”; Europhysics Letters **94**, 68002 (2011).
- [4] M. Matsushita, H. Fujikawa; “*Diffusion-limited growth in bacterial colony formation*”; Physica A **168**, 498–506 (1990).
- [5] S. Kimiagar; “*Fractal Shape of Cancer Tumor Growth*”; Biochemistry and Biophysics **1**, 7–12 (2013).
- [6] A. L. Barabasi, H. E. Stanley; “*Fractal Concepts in Surface Growth*”, Cambridge: Cambridge University Press (1995).
- [7] X. Mathew, G. W. Thompson, V. P. Singh, J. C. McClure, S. Velumani, N. R. Mathews, P. J Sebastian; “*Development of CdTe thin films on flexible substrates— a review*”; Physica A **76**, 293–303 (2003).
- [8] R. A. L. Almeida, S. O. Ferreira; “*Escala Anômala Facetada e Indícios da Universalidade além da Invariância de Escala em Filmes Finos de CdTe/Si(001)*”, Monografia, Universidade Federal de Viçosa, (2013).

Referências bibliográficas

- [9] R. A. L. Almeida, S. O. Ferreira, T. J. Oliveira, F. D. A. A. Reis; “*Universal fluctuations in the growth of semiconductor thin films*” arXiv:1312.1478v1
- [10] M. Eden; “*Proc. 4th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability* ed F. Neyman (Berkeley, CA:University of California Press)**4**, 223 (1961)
- [11] M. Prähofer, H. Spohn; “*Universal Distributions for Growth Processes in 1+1 Dimensions and Random Matrices*”; Physical Review Letters **84**, 4882 (2000).
- [12] K. A. Takeuchi; “*Crossover from Growing to Stationary Interfaces in the Kardar-Parisi-Zhang Class*”; Physical Review Letters **110**, 210604 (2013).
- [13] C. Escudero; “*Dynamics of curved interfaces*”; Annals of Physics, **324**, 1796–1814 (2009)
- [14] P. Freche, D. Stauffer, H. E. Stanley; “*Surface structure and anisotropy of Eden clusters*”; Journal of Physics A **18**, L1163–L1168 (1985)
- [15] R. Hirsch, D. E. Wolf; “*Anisotropy and scaling of Eden clusters in two and three dimensions*”; Journal of Physics A **19**, L251–L256 (1986)
- [16] E. W. Kuennen, C. Y. Wang; “*Off-lattice radial Eden cluster growth in two and three dimensions*”; Journal of Statistical Mechanics, P05014 (2008)
- [17] C. Y. Wang, P. L. Liu, J. B. Bassingthwaite; “*Off-lattice Eden-C cluster growth model*”; Journal of Physics A **28**, 2141–2147 (1995)
- [18] R. Jullien, P. Meakin; “*Simple three-dimensional models for ballistic deposition with restructuring*”; Europhysics Letters **4**, 1385–1390 (1987)
- [19] C. Escudero; “*Stochastic growth equations on growing domains*”; Journal of Statistical Mechanics, P07020 (2009)
- [20] A. A. Masoudi, S. Hosseinabadi, J. Davoudi, M. Khorrami, M. Kohandel; “*Statistical analysis of radial interface growth*”; Journal of Statistical Mechanics, L02001 (2012)

Referências bibliográficas

- [21] J. M. Pastor, J. Galeano; “*New dynamic scaling in increasing systems*”; Central European Journal of Physics **5**, 539–548 (2007)
- [22] B.B Mandelbrot; “*Fractal geometry: what is it, and what does it do?*”, Proceedings of the Royal Society A **423**, 3–16 (1989)
- [23] T. A. Assis, J. G. V. Miranda, F. B. Mota, R. F. S. Andrade, C.M. C. Castilho; “*Geometria fractal: propriedades e características de fractais ideais*”, Revista Brasileira de Ensino de Física, **30**, 2304 (2008)
- [24] P. Meakin, P. Ramanlal, L.M Sander, R.C Ball; “*Ballistic deposition on surfaces*”, Physical Review A, **34**, 5091–5103 (1986)
- [25] B. A. Mello, A. S. Chaves, F. A. Oliveira; “*Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid*”, Physical Review E, **63**, 041113 (2001)
- [26] T. Halpin-Healy; “*(2 + 1)-Dimensional Directed Polymer in a Random Medium: Scaling Phenomena and Universal Distributions*”, Physical Review Letters, **109**, 170602 (2012)
- [27] T. Halpin-Healy; “*Extremal paths, the stochastic heat equation, and the three-dimensional Kardar-Parisi-Zhang universality class*”, Physical Review E, **88**, 042118 (2013)
- [28] T.J. Oliveira, S. G. Alves, S. C. Ferreira; “*Kardar-Parisi-Zhang universality class in (2 + 1) dimensions: Universal geometry-dependent distributions and finite-time corrections*”, Physical Review E, **87**, 040102 (2013)
- [29] C. Escudero; “*Dynamic Scaling of Non-Euclidean Interfaces*”; Physical Review Letters **100**, 116101 (2008)
- [30] J. Krug; Comment on “*Dynamic Scaling of Non-Euclidean Interfaces*”; Physical Review Letters **102**, 139601 (2009)
- [31] C. Escudero; Comment on “*Dynamic Scaling of Non-Euclidean Interfaces*”; Physical Review Letters **102**, 139602 (2009)

Referências bibliográficas

- [32] S. B. Singha; “*Persistence of surface fluctuations in radially growing surfaces*”; Journal of Statistical Mechanics, P08006 (2005)
- [33] F. Family, T. Vicsek; “*Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model*”; Journal of Physics A: Mathematical and General **18**, L75–L81 (1985)
- [34] M. Kardar, G. Parisi, Y. C. Zhang; “*Dynamic Scaling of Growing Interfaces*”; Physical Review Letters **56**, 889–892 (1986)
- [35] S. G. Alves, T. J. Oliveira, S. C. Ferreira; “*Non-universal parameters, corrections and universality in Kardar–Parisi–Zhang growth*”; Journal of Statistical Mechanics, P05007 (2013)
- [36] R. Jullien, R. Botet; “*Scaling properties of the surface of the Eden model in $d = 2, 3, 4$* ”; Journal of Physics A **18**, 2 279 (1985)
- [37] F. Family; “*Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion*”; Journal of Physics A **19**, L441 (1986)
- [38] J. M. Kim, J. M. Kosterlitz; “*Growth in a Restricted Solid-on-Solid Model*”; Physical Review Letters **62**, 2289–2292 (1989)
- [39] Y.-K. Yu, N.-N. Pang, T. Halpin-Healy; “*Concise calculation of the scaling function, exponents, and probability functional of the Edwards-Wilkinson equation with correlated noise*”; Physical Review E **50** 5111-5114 (1994)
- [40] F. C. Frank; “*Nucleation-controlled growth on a one-dimensional growth of finite length*”; Journal of Crystal Growth **22** 233–236 (1974)
- [41] G. H. Gilmer; “*Transients in the rate of crystal growth*”; Journal of Crystal Growth **49** 465–474 (1980)
- [42] P. L. Ferrari, M. Prähofer; “*One-dimensional stochastic growth and gaussian ensembles of random matrices*”; In proceedings of “Inhomogeneous Random Systems 2005”, Markov Processes Relat. Fields **12** 203–234 (2006)

Referências bibliográficas

- [43] K. Johansson; “*Shape fluctuations and random matrices*”; Communications in Mathematical Physics **209** 437–476 (2000)
- [44] M. Prähofer, H. Spohn; “*Statistical self-similarity of one-dimensional growth processes*”; Physica A **279**, 342–352 (2000)
- [45] S. Raychaudhuri, M. Cranston, C. Przybyla, Y. Shapir; “*Maximal Height Scaling of Kinetically Growing Surfaces*”; Physical Review Letters **87**, 136101 (2001)
- [46] S. N. Majumdar, A. Comtet; “*Exact Maximal Height Distribution of Fluctuating Interfaces*”; Physical Review Letters **92**, 225501 (2004)
- [47] Z. Rácz, M. Plischke; “*Width distribution for (2+1)-dimensional growth and deposition processes*”; Physical Review E **50**, 3530–3537 (1994)
- [48] T. J. Oliveira, F. D. A. A. Reis; “*Finite-size effects in roughness distribution scaling*”; Physical Review E **76**, 061601 (2007)
- [49] S. F. Edwards, D. R. Wilkinson; “*The surface statistics of granular aggregate*”; Proceedings of the Royal Society A **381**, 17–31 (1982)
- [50] K. A. Takeuchi, M. Sano ; “*Universal Fluctuations of Growing Interfaces: Evidence in Turbulent Liquid Crystals*”; Physical Review Letters **104**, 230601 (2010)
- [51] K. A. Takeuchi, M. Sano, T. Sasamoto, H. Spohn ; “*Growing interfaces uncover universal fluctuations behind scale invariance*”; Scientific Reports doi:10.1038/srep00034 (2010)
- [52] K. A. Takeuchi, M. Sano ; “*Evidence for Geometry-Dependent Universal Fluctuations of the Kardar-Parisi-Zhang Interfaces in Liquid-Crystal Turbulence*”; Journal of Statistical Physics **147**, 853–890 (2012)
- [53] T. J. Oliveira, S. C. Ferreira, S. G. Alves ; “*Universal fluctuations in Kardar-Parisi-Zhang growth on one-dimensional flat substrates*”; Physical Review E **85**, 010601(R) (2012)

Referências bibliográficas

- [54] T. Sasamoto, H. Spohn ; “*One-Dimensional Kardar-Parisi-Zhang Equation: An Exact Solution and its Universality*”, Physical Review Letters **104**, 230602 (2010)
- [55] M. Kardar; “*Statistical Physics of Particles*”, Cambridge: Cambridge University Press (2007).
- [56] S. Matsuura, S. Miyazima; “*Self-affine fractal growth front of *Aspergillus oryzae**”, Physica A **191**, 30–34 (1992)
- [57] M.T. Batchelor, B.I. Henry, S.D. Watt; “*Continuum model for radial interface growth*”;Physica A **260**, 11–19 (1998)
- [58] R. Kapral, R. Livi, G-L. Oppo, A. Politi; “*Dynamics of complex interfaces*”;Physical Review E **49**, 2009–2022 (1994)
- [59] S. C. Ferreira,S. G. Alves; “*Pitfalls in the determination of the universality class of radial clusters*”;Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experimentdoi:10.1088/1742-5468/2006/11/P11007 (2006)
- [60] M. J. Vold; “*A numerical approach to the problem of sediment volume*”;Journal of Colloid and Interface Science **14**, 168-174 (1959)
- [61] D. N. Sutherland; “*Comments on Vold’s simulation of floc formation*”;Journal of Colloid and Interface Science **22**, 300–302 (1966)
- [62] F. Family; “*Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion*”;Journal of Physics A: Mathematical and General **19**, L441–L446 (1986)
- [63] J. Krug, P. Meakin, T. Halpin-Healy; “*Dynamics of complex interfaces*”;Physical Review A **45**, número 2, (1992)
- [64] T. Kriecherbauer, J. Krug; “*A pedestrian’s view on interacting particle systems, KPZ universality and random matrices*”;Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **43**, 403001, (2010)
- [65] J. Krug, H. Spohn; “*Mechanism for rough-to-rough transitions in surface growth*” Physical Review Letters **64** 2332-2332 (1990)

Referências bibliográficas

- [66] J. Krug, P. Meakin; “*Universal finite-size effects in the rate of growth processes*”
Journal of Physics A: Mathematical and General **23**, L987–L994 (1990)
- [67] S. R. A. Salinas; “*Introdução à física estatística*” Editora da Universidade de São Paulo (1997)