

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE UnB PLANALTINA
MESTRADO EM CIÊNCIA DE MATERIAIS

Classes de universalidade na equação de
Edwards-Wilkinson com memória

por

Diogo Pereira Almeida

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE UnB PLANALTINA

Classes de universalidade na equação de
Edwards-Wilkinson com memória

por

Diogo Pereira Almeida

Orientador: Professor Ismael Victor de Lucena Costa

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência de Materiais da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciência de Materiais.

Julho 2014

*Dedico a meu pai,
José Enes de Almeida,
minha mãe,
Matildes de Jesus Souza Almeida,
e à minha esposa,
Aline Gonçalves de Siqueira.*

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por abrir portas na minha vida, fornecendo-me saúde e sabedoria nas minhas escolhas e desafios. Ao meu orientador Professor Ismael Costa, pelo apoio e ensinamentos prestados, sempre com muita dedicação e demonstrando muito amor no que faz. Aos meus colegas de mestrado, onde vivenciei grandes momentos de alegria e compartilhamento de saber, destes, destaco meu amigo Washington, sempre solícito e prestativo. Aos professores do programa de pós-graduação que sempre demonstraram grande disponibilidade em ensinar. A secretaria de Educação do Distrito Federal que concedeu-me afastamento para estudos. À minha esposa Aline, que sempre me incentivou com sábias palavras, sabendo me levantar nos momentos mais difíceis dando-me grande motivo para continuar esta jornada. E, por fim, aos meus familiares, que de algum modo me ajudaram neste percurso.

Resumo

No presente trabalho, apresentamos um estudo da equação de Edwards-Wilkinson (EEW) que é uma equação de crescimento linear e estocástica [1]. Apresentamos uma metodologia de resolução da EEW mais simples do que a resolução apresentada no trabalho clássico de Nattermann [2]. Propusemos uma generalização da EEW para incluir os casos de crescimento com memória, ou seja, crescimentos cujas variações de altura sofrem influências explícitas de informações do passado. Denominamos esta nova equação de Edwards-Wilkinson com memória (EEWM). Em seguida, estudamos como diversas funções memórias repercutem nos expoentes críticos de crescimento. Obtivemos também uma resolução analítica que descreve a evolução da rugosidade para a EEWM e utilizando esta equação da rugosidade, analisamos outras funções memórias e como elas possibilitam uma mudança de suas classes de universalidade.

Abstract

In this work we study the Edwards-Wilkinson equation (EWE) for growth [1]. The EWE is a linear equation which contains diffusion and stochastic noise. We present a methodology for solve the EWE which is simpler than that presented in the classical work of Nattermann [2]. We propose a generalization of the EWE to include the so-called memory. I.e. a growth dynamics where remote events of the past are important to dynamic events in the present time. We call this new equation the Edwards-Wilkinson equation with memory (EWEM). We investigate how the memories can change the critical growth exponents. Moreover, we obtain an analytical solution to describe the roughness evolution, and to determine how memories change the exponents and its universality class.

Sumário

1	Introdução	11
2	Crescimento	13
2.1	Crescimento de interfaces rugosas e seus modelos	13
2.1.1	Rugosidade	15
2.2	Relação de escalas e lei de Family-Vicsek	18
2.3	Modelo discreto e a equação de crescimento estocástico	20
2.3.1	Modelo de deposição aleatória com relaxação superficial - DARS	20
2.3.2	Equação de crescimento	22
3	Equação de Edwards-Wilkinson - EEW e resolução por reescalas	27
3.1	Reescalas no domínio real	28
3.2	Reescalas no domínio das frequências	31
3.2.1	Transformada de Fourier	31
3.2.2	Relações de escala	35
3.2.3	Obtenção dos expoentes de crescimento	37
4	Equação de Edwards-Wilkinson com memória - EEWM e resolução por reescala	38
4.1	Equação de Edwards-Wilkinson com memória - EEWM	38
4.2	Expoentes de crescimento de EEWM para funções memórias reescaláveis	40
4.2.1	Parâmetro gama e classe de universalidade de KPZ	42
4.2.2	Propostas de algumas funções memórias reescaláveis	43
5	Resolução analítica da Equação de Edwards-Wilkinson	48
5.1	Solução da Equação de Edwards-Wilkinson	48
5.2	Rugosidade	49
5.2.1	Na EEW, a média das alturas.	50

5.3	Cálculo da rugosidade usando o espaço de frequências	51
5.3.1	Recapitulação dos conceitos de convolução e transformada de Fourier	51
5.3.2	Função de correlação da altura	53
5.3.3	Função de correlação do ruído	54
5.4	Rugosidade	55
6	Resolução analítica da Equação de Edwards-Wilkinson com memória - EEWM	61
6.1	Transformada de Laplace	61
6.2	Resolução da EEWM	63
6.2.1	Função de correlação da altura	63
6.2.2	Rugosidade	64
6.3	Discussões e casos particulares	65
7	Conclusão	72

Lista de Figuras

2.1	Altura $h(t)$ em função do tempo t , para uma superfície de crescimento genérico de tamanho L e dimensão $1 + 1$. Para tal instante, a altura média do substrato se localiza na altura $h = 4$	14
2.2	Rugosidade $w(t)$ em função do tempo. Mostra-se claramente dois intervalos distintos do crescimento. Primeiramente ocorre um crescimento descrito por uma lei de potência. Depois ocorre o que chamamos de saturação. A rugosidade de saturação é a rugosidade um tempo longo.	16
2.3	Percebe-se uma clara dependência da rugosidade de saturação e do tempo de saturação, com o tamanho L do substrato. Utilizamos neste gráfico valores de crescimento de KPZ [16].	17
2.4	Esquema que mostra a dependência da rugosidade em relação ao tempo para diferentes valores de L . Na segunda e terceira figuras há uma reescala nas grandezas da rugosidade e do tempo respectivamente, de tal maneira que observamos o colapso das curvas.	18
2.5	Figura esquemática onde mostra as seis possibilidades de deposição para um modelo aleatório com relaxação superficial - DARS	21
2.6	Efeito da tensão superficial sobre a interface. Extraído de [17]	26
4.1	Algumas possibilidades para a função memória, para todas quando $t \rightarrow \infty$ o termo $\nu \rightarrow 0$	40
4.2	Gráfico da função memória $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$, com 3 possíveis valores de n	45
4.3	Mostra-se a evolução dos expoentes α e z em relação a variável n da função memória $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$	46
6.1	Gráfico com a evolução no tempo da rugosidade $w(L, t)$ de um substrato de tamanhos $L=512, 1024, 2048, 4096, 8192$ e 16384	68
6.2	Gráfico com a evolução no tempo da rugosidade $w(L, t)$ de um substrato de tamanho $L=16384$, juntamente com a curva de ajuste que fornece o valor do expoente β	69
6.3	Gráfico que representa ajuste de curva realizado com os w_{satts} , para obtenção do expoente de saturação α	70

Lista dos símbolos

EW - Edwards-Wilkinson.

KPZ - Kardar-Parisi-Zhang.

EEW - Equação de Edwards-Wilkinson.

EEWM - Equação de Edwards-Wilkinson com memória.

DARS - Deposição aleatória com relaxação superficial.

TF - Transformada de Fourier.

TFI - Transformada de Fourier Inversa.

TL - Transformada de Laplace .

TLI - Transformada de Laplace Inversa.

w_{sat} - Rugosidade de saturação.

t_{sat} - Tempo de saturação.

z - Expoente dinâmico.

α - Expoente de saturação.

β - Expoente de crescimento.

$\nu(t)$ - Função memória.

η - Ruído.

Capítulo 1

Introdução

O crescimento de interfaces é objeto de estudo comum nas mais variadas áreas e campos de pesquisa. Um dos aspectos que torna esta área complexa e atraente é justamente a quantidade de elementos interagentes envolvidos. Existem inúmeros processos de crescimentos, podemos citar alguns: corrosão [3, 4], propagação de fogo [5, 6], deposição atômica [7], evolução de uma colônia de bactérias [8, 9], modelos de autômatos celulares [10], crescimentos epitaxiais [11].

Um papel primordial no estudo de interfaces é a classificação dada a grupos de crescimentos. Grupos estes chamados *classes de universalidade*, que são rotulados de acordo com seus expoentes críticos do crescimento, possibilitando que crescimentos aparentemente distintos pertençam a mesma classe, isto acontece quando possuem os mesmos expoentes, o que significa possuírem características físicas comuns, como, simetrias e interações entre partículas vizinhas. Ou seja, mesmo que tenham origens e morfologias completamente distintas, os crescimentos de mesma classe de universalidade, compartilham de semelhanças na sua formação e dinâmica. Dentre as classes existentes, duas se destacam pela relevância e atenção dada à área científica. A classe de *Edwards-Wilkinson - EW* e a classe de *Kardar-Parisi_Zhang - KPZ*

Existem três modos em se analisar um crescimento: método experimental, simulação computacional (método discreto) e método analítico. O método experimental consiste em observações laboratoriais ou de campo, já a simulação computacional, na elaboração de algoritmos que simulem crescimentos realísticos, e por último, o método analítico, que baseia-se na elaboração de modelos representados por equações matemáticas que descrevam certos crescimentos, em geral, equações diferenciais estocásticas.

Muitos sistemas físicos mencionados estão bem descritos por modelos discretos, por exemplo, um átomo se junta ao agregado, uma árvore pega fogo, uma bactéria nasce. Tais modelos são bem adaptados às simulações numéri-

cas, e podem começar a partir de uma descrição muito simplificada na escala elementar. Mas nem todos sistemas podem ser representados por estes modelos, então, busca-se matematicamente equações diferenciais estocásticas que descrevam o processo de crescimento desejado. Devido ao seu caráter aleatório, estas equações descrevem as flutuações e variações de um crescimento de superfície e podem ser equações lineares ou não-lineares. Neste trabalho focaremos na equação linear de difusão, acrescida de um termo estocástico, também chamada de Equação de Edwards-Wilkinson (EEW). Através do cálculo de seus expoentes de crescimento, definiremos sua respectiva classe de universalidade (EW) e as características dinâmicas da interface. Este cálculo será realizado de duas formas: pela teoria de reescalas e por transformadas de Fourier.

O principal objetivo deste estudo, é inserir uma função memória a EEW, com o propósito de observarmos a dinâmica do crescimento e eventuais mudanças em seus expoentes críticos. E assim, propor novos modelos contínuos (equações) para classes de universalidades já conhecidas. Dentre estas classes, pretendemos a KPZ. E o motivo de tal pretensão, está em dois fatos: primeiro, apesar de KPZ já possuir uma equação bastante difundida e conhecida, a mesma é de difícil manipulação algébrica, pois trata-se de uma equação diferencial não-linear e estocástica, e segundo, KPZ é uma classe de universalidade com aplicações bastante conhecidas, como por exemplo, em crescimento de corrosão e materiais semicondutores nanoestruturados.

De início, fazemos um apanhado teórico, com conceitos e definições necessárias para a continuidade do estudo e para o posterior desenvolvimento matemático do processo. Definimos os expoentes de crescimento, e mostramos as relações possíveis de se estabelecerem entre estes, permitindo conexões entre diferentes interfaces e estabelecendo ligações entre áreas distintas. Partimos de um modelo discreto e o associamos a uma equação de crescimento estocástica, no caso a equação de Edwards-Wilkinson (EEW).

Ao final, através da equação de Edwards-Wilkinson com memória (EEWM) e utilizando a mesma metodologia dos capítulos anteriores, identificaremos um caso particular e obtemos uma generalização da solução da EEWM, citando exemplos de funções memórias que modifiquem o processo de crescimento. No caso particular, mesclando transformadas de Fourier e Laplace, formulamos uma solução mais simplificada para crescimentos de Edwards-Wilkinson. Encontramos a solução da equação para algumas funções memórias e mostramos o comportamento existente da rugosidade para cada uma destas.

Capítulo 2

Crescimento

2.1 Crescimento de interfaces rugosas e seus modelos

Superfícies rugosas são rotineiramente encontradas na natureza, ou em simulações computacionais. O estudo do crescimento de tais superfícies e suas interfaces é feito através da analogia entre o fenômeno real e modelos teóricos, buscando métodos e ferramentas que descrevam as dinâmicas dessas superfícies.

Um dos entraves na formulação de um modelo que represente uma superfície de crescimento, é saber qual geometria utilizar em sua representação morfológica. É comum encontrarmos estruturas e interfaces complexas, que fogem dos padrões da geometria euclidiana. Recentemente, a ciência avançou bastante nesta área, com uma contribuição fundamental de Benoit Mandelbrot [12], em 1975. Mandelbrot criou o conceito de fractal, contribuindo na elaboração da geometria fractal, com conceitos capazes de descrever macroestruturas, como uma cordilheira de montanhas, com a mesma eficiência e detalhes que descreve pequenas estruturas, como por exemplo, um polímero. A concepção da geometria fractal nos permite trabalhar com conceitos de escalas, fundamental na construção dos modelos de crescimento. Neste trabalho, usaremos estruturas que não se modificam com a mudança da escala de observação, mais especificamente com superfícies auto-afins, ou seja, com estruturas invariantes sob transformações anisotrópicas.

Mostraremos dois modos de representação de um crescimento: O modo discreto, representado por modelos de deposições, com a qual nos permitirá enxergar as características e analisar o crescimento, e o modo contínuo, onde as equações estocásticas representarão os modelos discretos propostos anteriormente, focando em duas classes de universalidades específicas, EW e KPZ

(detalhadas mais adiante).

Trabalhamos num processo de deposição de partículas idênticas sobre um substrato unidimensional (ou sistema de dimensão 1+1), onde se utiliza a posição e altura do substrato. Alguns exemplos de crescimentos que trabalham com estas dimensões como a queima de uma folha de papel [13] e o crescimento de uma colônia de bactéria em placas ou lâminas [8, 9]. Nestes casos, a espessura da folha ou da colônia sobre a lâmina é desprezível.

Estes substratos unidimensionais são simulados com tamanho de L sítios onde ocorrem deposições de partículas, cada uma destas ocupa um único sítio, podendo uma sobrepor-se a outra. Assumimos também que a cada intervalo de tempo, há exatamente L deposições. A Fig. 2.1 indica um modelo simples de deposição de partículas.

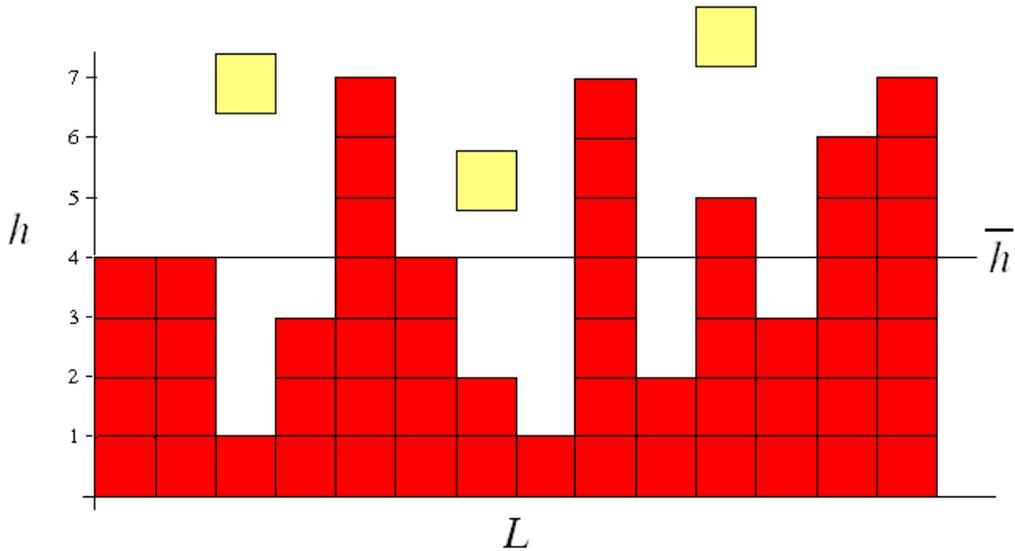


Figura 2.1: Altura $h(t)$ em função do tempo t , para uma superfície de crescimento genérico de tamanho L e dimensão $1 + 1$. Para tal instante, a altura média do substrato se localiza na altura $h = 4$.

Na fig. 2.1 mostramos um modelo simples de deposição. Nela retratamos a altura $h(t)$ em função do tempo t . O sistema tem dimensão 1+1 e comprimento L . Definimos a unidade do tempo como $\Delta t = \frac{1}{h}$, de modo que $t = 1$ significa que foram feitas h deposições. Utilizamos as coordenadas cartesianas, com a origem no ponto inicial do substrato. O eixo das ordenadas equivale a altura do substrato, que é definida por $h(x, t)$ correspondente a altura na posição x no instante t . Já a altura média do substrato é definida do seguinte modo

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L} \sum_{x=1}^L h(x, t). \quad (2.1)$$

Para facilitar os desenvolvimentos posteriores, a altura média será utilizada como referência para o cálculo da altura $h(x, t)$. Ou seja, valores negativos de $h(x, t)$ significam alturas abaixo desse referencial.

2.1.1 Rugosidade

A altura média é insuficiente para obtermos informações importantes a respeito das superfícies. Duas interfaces de mesma altura média podem possuir rugosidades diferentes, uma pode ter uma superfície mais “lisa” e outra mais “áspera”. As flutuações das amplitudes da interface em relação ao comprimento L do sistema e o tempo de deposição das partículas, caracteriza a rugosidade da superfície, onde matematicamente esta é definida pela expressão que se segue[14]:

$$w(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{x=1}^L (h(x, t) - \bar{h}(t))^2}. \quad (2.2)$$

A rugosidade é uma das grandezas de maior interesse, pois fornece uma medida de dispersão de alturas em torno de uma altura média. Elaborando um gráfico da evolução temporal da largura da superfície, é possível observar duas regiões separadas por um cruzamento no tempo t_{sat} (Figura 2.2) [15]

Na fig. 2.2 e 2.3. mostramos a evolução da rugosidade $w(L, t)$ para diversos comprimentos L . Observamos que a rugosidade cresce inicialmente com uma lei de potência

$$w(L, t) \sim t^\beta \quad \text{para } t \ll t_{sat}, \quad (2.3)$$

onde β é o expoente de crescimento, e t_{sat} é o tempo de saturação, como mostrado na figura 2.2.

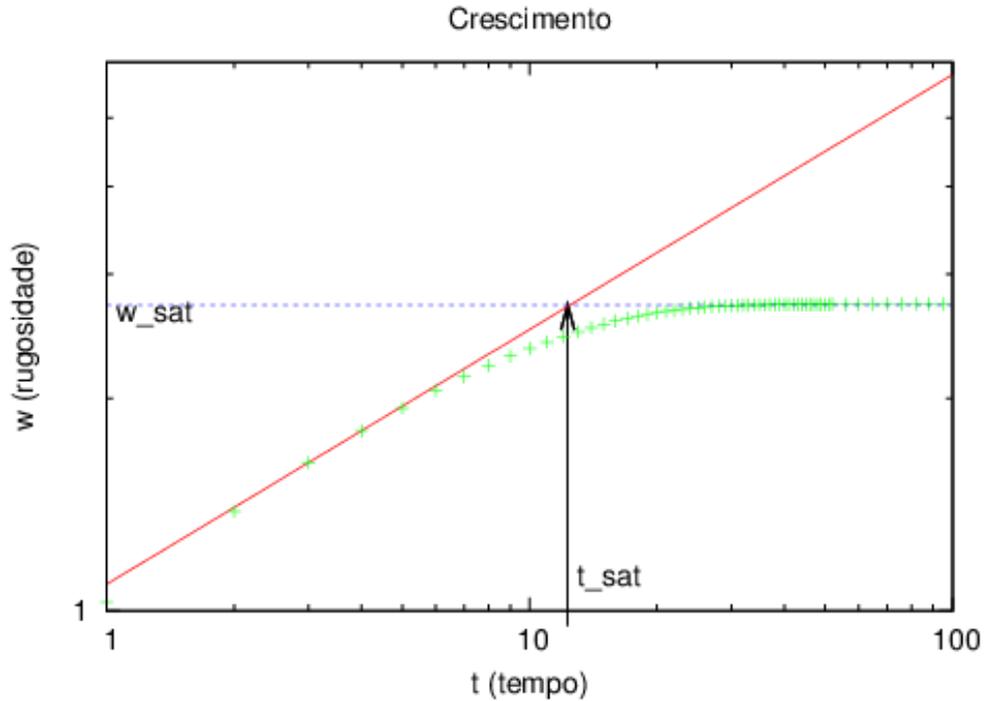


Figura 2.2: Rugosidade $w(t)$ em função do tempo. Mostra-se claramente dois intervalos distintos do crescimento. Primeiramente ocorre um crescimento descrito por uma lei de potência. Depois ocorre o que chamamos de saturação. A rugosidade de saturação é a rugosidade um tempo longo.

A rugosidade de saturação, definida por w_{sat} , obedece a seguinte relação

$$w_{sat} \sim L^\alpha \quad \text{para } t \gg t_{sat}, \quad (2.4)$$

onde α é chamado expoente de saturação ou de rugosidade. O tempo de saturação é definido pela região onde a equação 2.3 cruza com $w = w_{sat}$, ver fig. 2.2 e obedece a seguinte lei de escala

$$t_{sat} \sim L^z, \quad (2.5)$$

em que z é chamado expoente dinâmico.

Classe de universalidade é uma forma de se distinguir modelos de crescimento com diferentes expoentes α, β e z , sendo assim, um modelo é colocado dentro de uma classe de universalidade de acordo com os valores de seus expoentes críticos de crescimento, ou seja, modelos pertencentes a mesma classe de universalidade possuem os mesmos expoentes. Isso permite fazer com que diferentes crescimentos, que a princípio pareçam desconexos, possam estar

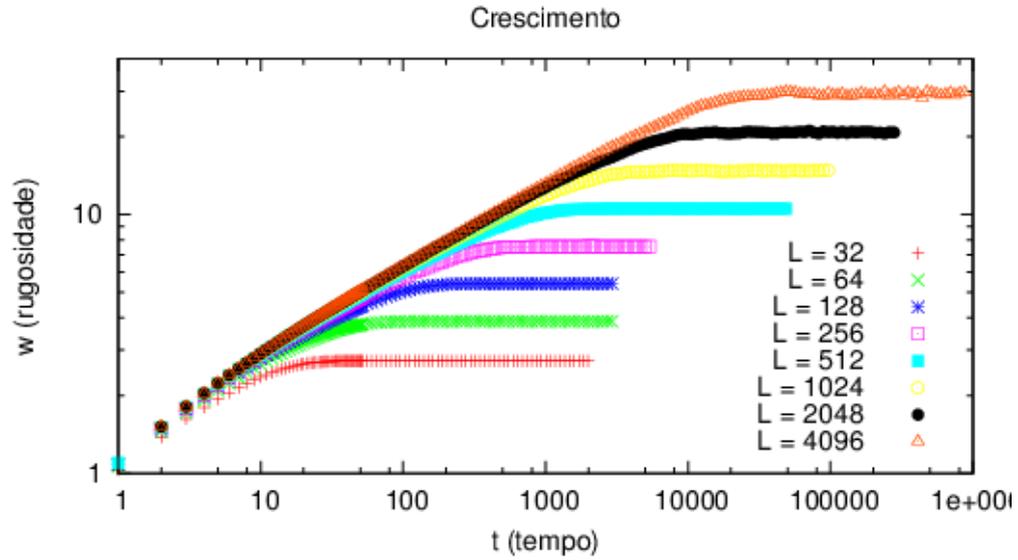


Figura 2.3: Percebe-se uma clara dependência da rugosidade de saturação e do tempo de saturação, com o tamanho L do substrato. Utilizamos neste gráfico valores de crescimento de KPZ [16].

relacionados de alguma forma, isto é, possuam elementos que mantenham um caráter de afinidade, e dessa forma podem ser trabalhados em conjunto [17]. Dentre as classes de universalidades existentes, duas se destacam pela relevância e atenção dada na área científica, *Edwards-Wilkinson* - EW e *Kardar-Parisi-Zhang* - KPZ , abaixo temos uma tabela com os valores dos expoentes de crescimento respectivos a EW e KPZ .

	α -rugosidade	β -crescimento	z -dinâmico
EW	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	2
KPZ	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{3}{2}$

Tabela 2.1: Expoentes de crescimento das classes de universalidade de EW e KPZ .

2.2 Relação de escalas e lei de Family-Vicsek

Os expoentes são responsáveis por identificar em qual classe de universalidade se insere uma determinada dinâmica de crescimento, estes podem ser obtidos por dois processos distintos: experimentais ou teóricos. Os métodos teóricos são os mais variados possíveis, indo das simulações aos diversos métodos analíticos. Nos processos que envolvem as simulações, gera-se a evolução temporal dos dados da rugosidade ($w(x, t)$), e após esse procedimento é realizado a plotagem dos respectivos dados na forma de um gráfico, como pode ser observado na fig. 2.3. Através de ajustes de curvas no gráfico obtêm-se os valores dos expoentes críticos, isto é, consegue-se chegar aos expoentes de rugosidade α , de crescimento β e dinâmico z , não necessariamente nessa ordem. Um fato importante, descoberto por Family e Vicsek em 1985 [18] é que estes expoentes não são totalmente independentes, usando as relações (2.4), (2.5) e (2.3) é possível obter uma nova relação, que descreveremos a seguir.

No gráfico da fig. 2.3, temos as curvas obtidas de ($w \times t$), para diferentes valores de L . Já na fig. 2.4, mostra-se um colapso destas curvas em uma única função $f(u)$, chamada *função de escala*.

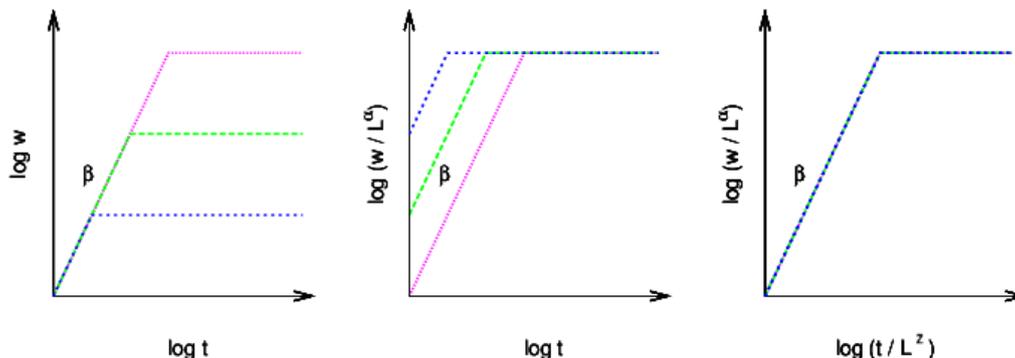


Figura 2.4: Esquema que mostra a dependência da rugosidade em relação ao tempo para diferente valores de L . Na segunda e terceira figuras há uma reescala nas grandezas da rugosidade e do tempo respectivamente, de tal maneira que observamos o colapso das curvas.

Nesta figura esquematiza-se os procedimentos que permitem escrever uma função de escala para a rugosidade. Na primeira parte da figura temos rugosidades diferentes para cada valor de L . Conforme observamos na segunda parte da figura, ao utilizarmos a reescala $w \equiv \frac{w}{w_{sat}}$, todas as curvas passam a se saturar em um mesmo ponto do eixo da rugosidade, mas em tempos dife-

rentes. Já em seguida, utilizando uma reescala do tipo $t \equiv \frac{t}{t_{sat}}$, é gerado um deslocamento horizontal das curvas, provocando um “colapso” das mesmas, conforme pode ser observado na terceira parte da figura.

A curva da rugosidade no gráfico da fig. 2.3 está em função do tempo, ou seja,

$$w(L, t) \equiv f(t). \quad (2.6)$$

Posteriormente realizando reescalas em $w \equiv \frac{w}{w_{sat}}$ e $t \equiv \frac{t}{t_{sat}}$, temos

$$\frac{w(L, t)}{w_{sat}} \equiv f\left(\frac{t}{t_{sat}}\right). \quad (2.7)$$

Agora, utilizando as relações (2.4) e (2.5),

$$w(L, t) \equiv L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (2.8)$$

que é chamada de *relação de escala de Family-Vicsek*.

Como visto anteriormente, observando o gráfico 2.4 fica claro a existência de dois momentos diferentes para a função $f(t)$, onde cada momento fornece uma relação de escala diferente um do outro. O primeiro para $[t \ll t_{sat}]$ e o segundo para $[t \gg t_{sat}]$. Isto significa dizer que o tempo de saturação t_{sat} divide estes dois momentos da rugosidade w , ou seja, podemos nos aproximar do valor da rugosidade $w(t_{sat})$ pela esquerda ($t \ll t_{sat}$) e pela direita ($t \gg t_{sat}$), onde obteremos exatamente as relações (2.4) e (2.3), de onde tem-se:

$$L^\alpha \sim t^\beta. \quad (2.9)$$

E agora utilizando a relação (2.5), obtemos:

$$L^\alpha \sim (L^z)^\beta.$$

De onde obtemos a **Lei de Family-Vicsek**,

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (2.10)$$

Esta equação mostra a dependência existente entre os coeficientes α , β e z . Mas é importante notar que a eq. 2.10 só vale para crescimentos que obedeçam a relação de Family-Vicsek mostrada em (2.8).

2.3 Modelo discreto e a equação de crescimento estocástico

De um modo geral a natureza é discreta, embora até o início do séc. XX tenha predominado a descrição contínua de natureza. Mesmo em uma escala microscópica muitos sistemas físicos são bem descritos por modelos discretos, por exemplo, átomo se juntando em um agregado, árvores em chamas transferindo o fogo para vizinhas, bactérias que nascem em meio a uma colônia. Tais modelos são bem adaptados às simulações numéricas, pois podem começar a partir de uma descrição muito simplificada na escala elementar [19].

Há alguns métodos desenvolvidos para caracterizar quantitativamente objetos cujas morfologias não dependam da escala de observação. Ou seja, nosso interesse é no estudo de interfaces rugosas autoafins, geradas por processos de deposição de partículas idênticas sobre um substrato inicialmente liso. Focando no crescimento de Edwards-Wilkinson, exporemos o modelo discreto com suas ideias e conceitos, e logo após por princípios de simetria, associaremos a estes princípios equações de crescimento estocásticas (contínuas), e assim daremos um tratamento analítico, discutindo as classes de universalidade e suas possíveis mudanças.

2.3.1 Modelo de deposição aleatória com relaxação superficial - DARS

Nosso foco será específico a crescimentos da classe de universalidade de Edwards-Wilkinson, por este motivo apresentaremos um único modelo discreto, chamado de DARS, o qual representa esta classe(mais adiante explicaremos o interesse em EW).

No modelo de deposição aleatória com relaxação superficial - DARS, a partícula se move para o sítio de menor altura. Dessa forma o processo produz uma superfície com uma morfologia.

Embora o processo de crescimento do modelo ser do tipo local, cada um dos sítios do modelo possui capacidade de armazenar “informação” a respeito das alturas dos seus primeiros vizinhos, isto é, o sítio escolhido para deposição de uma determinada partícula, possui informações a respeito dos sítios adjacentes. A largura da região contendo os sítios correlacionados, que chamaremos de comprimento de correlação ξ , cresce lateralmente com o tempo. Porém para um determinado sistema de rede finita, ξ não pode crescer indefinidamente pois é limitado pelo tamanho da rede L . Quando o comprimento de correlação ξ atinge o tamanho da rede L todo o sistema está

correlacionado e o modelo atinge um regime saturado [20].

Portanto neste modelo, ocorre a saturação da rugosidade, ou seja, a rugosidade apresenta um limite de crescimento, o que permite encontrarmos o valor do expoente de saturação α . Este fato ocorre graças a existência de uma correlação entre os primeiros vizinhos de cada sítio da interface.

As deposições ocorrem aleatoriamente, sendo que a partícula a ser agregada ao sistema procura entre seus sítios vizinhos, o de menor altura. Se os sítios vizinhos tem a mesma altura do sítio escolhido inicialmente, a partícula permanece no sítio atual. Para uma melhor visualização, esquematizamos na fig. 2.5, o funcionamento do modelo DARS.

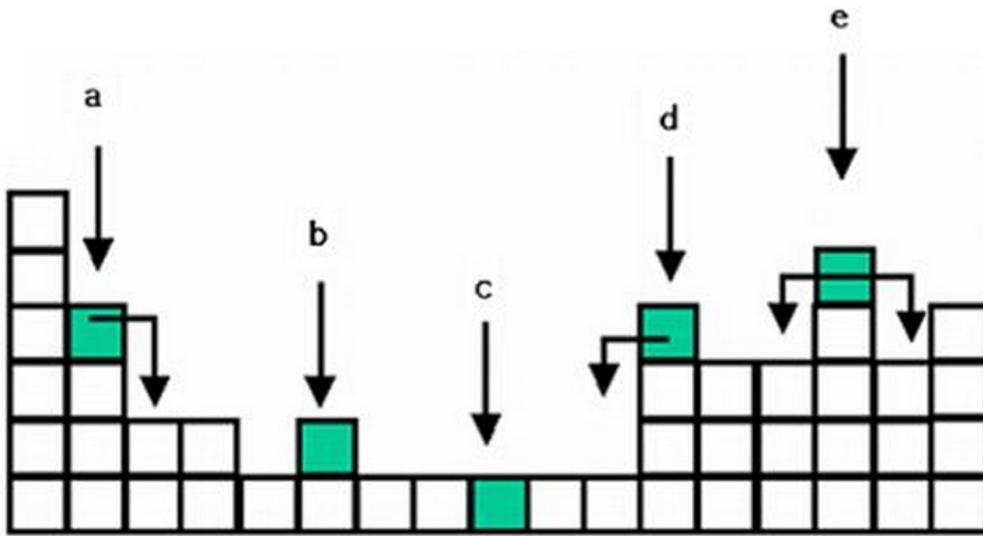


Figura 2.5: Figura esquemática onde mostra as seis possibilidades de deposição para um modelo aleatório com relaxação superficial - DARS

Este modelo não apresenta solução exata para o caso discreto. Barabasi [15] mostra, por simulação, os valores para os expoentes de crescimento α , β e z , de onde conclui-se que este modelo de deposição encontra-se na classe de universalidade de Edwards-Wilkinson. Queremos associar o modelo discreto DARS a um modelo analítico, no caso, associamos a uma equação diferencial estocástica. E, partindo da equação podemos encontrar os expoentes de crescimento associados ao modelo de deposição aleatória com relaxação superficial. Na próxima seção definiremos esta equação.

2.3.2 Equação de crescimento

Existem basicamente duas abordagens para o estabelecimento das equações estocásticas. Podemos tratar um determinado crescimento caracterizando seus mecanismos por expressões apropriadas, por exemplo, pela equação de difusão, ou, conforme faremos adiante, podemos expressar as simetrias do problema, obtendo as expressões das equações [21].

Há alguns modelos matemáticos que descrevem evoluções de interfaces, em nosso caso, devido ao caráter aleatório do crescimento, a melhor abordagem é associar o crescimento a uma equação estocástica.

A evolução do crescimento de uma determinada interface está ligada a evolução temporal da altura $h(x, t)$, onde pode ser representada pela seguinte equação diferencial.

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \phi(x, t), \quad (2.11)$$

Introduzimos uma equação diferencial com o objetivo de determinar a variação temporal da altura da interface, onde $\phi(x, t)$ é o valor instantâneo do número de partículas depositadas na posição x da superfície, por unidade de tempo. Devido ao caráter aleatório do processo, o fluxo de partículas não é uniforme, de maneira que podemos decompor $\phi(x, t)$ em dois termos, reescrevendo como

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = F + \eta(x, t). \quad (2.12)$$

O primeiro termo, F é uma constante e representa o fluxo médio de partículas incidentes na posição x , por unidade de tempo. O segundo termo é um ruído que, para descrever bem as flutuações do processo, deve satisfazer certas condições, as quais descreveremos com detalhes mais adiante.

É útil reescrever a eq. 2.12 de maneira que a interface seja descrita a partir de um referencial que se move com a mesma velocidade da sua altura média.

Para isso, escrevemos

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial Ft}{\partial t} + \eta(x, t),$$

em que F está em função de uma derivada parcial em relação ao tempo t , ou seja, $\frac{\partial Ft}{\partial t}$ representa a velocidade da altura média. E agora, reescrevemos,

$$\frac{\partial(h(x, t) - Ft)}{\partial t} = \eta(x, t), \quad (2.13)$$

simplificando a notação, temos

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

onde o termo $\frac{\partial h(x,t)}{\partial t}$ é a velocidade de deslocamento da interface, e é medida em relação a um referencial que se move com a velocidade da altura média. E esta velocidade depende exclusivamente do tipo de ruído $\eta(x,t)$ que estamos lidando.

Princípios de simetria

Ao se formular uma equação para descrever um crescimento ou até mesmo um modelo de deposição, deve-se atentar para certos princípios de simetria do sistema. Tendo isto posto, buscamos uma equação o mais simples possível, que seja compatível com os argumentos de simetria exigidos para o crescimento em questão. Queremos generalizar uma equação para qualquer situação de interfaces de crescimento [15]. E para isso, reescrevemos a eq 2.12 de uma forma mais geral.

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = H(h,x,t) + \eta(x,t) \quad (2.15)$$

$H(h,x,t)$ é uma função geral que depende da posição, altura e o tempo da interface. Esta função representa a dinâmica do crescimento, este termo depende da relação entre as partes, ou seja, depende do meio em que está inserido o crescimento, por exemplo, a dinâmica de crescimento em uma colônia de bactérias é diferente da dinâmica de crescimento de uma população de uma cidade. Já o segundo termo $\eta(x,t)$ é o termo estocástico, chamado de ruído do crescimento, responsável pela flutuação ou aleatoriedade do crescimento da interface.

Agora, vejamos algumas simetrias básicas do crescimento:

1. **Invariância temporal:** A equação não deve depender de onde definimos o tempo inicial, ou seja, deve ser invariante sob translação, $T \rightarrow t + \Delta t$, com isso temos que $H(h,x,t) = H(h,x)$.
2. **Invariância translacional na direção do crescimento:** A equação não deve depender de onde definimos o valor inicial da altura h_0 , ou seja, deve ser invariante sob a translação, $h \rightarrow h + \Delta h$, com isso todos os termos h^n , não devem pertencer a equação de crescimento. Já termos $\nabla^n h$ satisfazem a simetria e devem estar na equação, e $H(h,x,t) = H(h,x)$.
3. **Invariância translacional perpendicular a direção do crescimento:** A equação não deve depender de onde definimos o valor inicial de x_0 , ou seja, deve ser invariante sob a translação, $x \rightarrow x + \Delta x$, com isso temos que $H(h,x,t) = H(h,x)$, nenhum termo explícito de x deve pertencer a equação.

4. **Simetria de inversão e rotação em torno da direção do crescimento:** A equação de crescimento deve ser independente da direção do eixo da coordenada paralela à superfície, em outras palavras, o sistema deve ser invariante com relação a inversão de x para $-x$. Esta condição exclui qualquer derivada de ordem ímpar, ou seja, termos do tipo $\nabla^{2n+1}h$. Mas permite termos como, $(\nabla^{2n+1}h)^{2m}$, com $m = 0, 1, 2, 3, \dots$
5. **Simetria up/down de h:** A equação de crescimento deve ser independente de onde definimos o sentido do eixo da coordenada perpendicular à superfície, em outras palavras, o sistema deve ser invariante com relação a inversão de h para $-h$. Esta condição exclui qualquer derivada do tipo, $(\nabla^n h)^{2m}$, com $m = 0, 1, 2, 3, \dots$

Respeitando todos os princípios de simetria citados, a eq. 2.15 na forma generalizada passa a ter o seguinte formato:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = (\nabla^2 h) + \dots + (\nabla^{2n} h) + (\nabla^2 h) (\nabla h)^2 + \dots + (\nabla^{2m} h) (\nabla h)^{2l} + \eta(x, t) \quad (2.16)$$

com m, n e l quaisquer inteiros positivos.

A flutuação ou ruído $\eta(x, t)$ consiste numa função estocástica com propriedades específicas, como valor médio e correlações espaciais e temporais. Ao se trabalhar com ruído nas dinâmicas de crescimento, podemos classificá-los em dois tipos: ruído difusivo e de deposição [15].

Nesse estudo consideraremos o ruído $\eta(x, t)$ sendo uma função cuja média em todas as possíveis realizações de simulações (média no ensemble) possui a propriedade

$$\langle \eta(x, t) \rangle = 0. \quad (2.17)$$

Quer dizer que o ruído é não correlacionado. E satisfaz também

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = 2D \delta(x - x') \delta(t - t'). \quad (2.18)$$

A condição (2.18) mostra que o ruído não tem correlação espaço-temporal. Obedecendo as condições (2.17) e (2.18), significa dizer que $\eta(x, t)$ é decorrelacionado e segue uma distribuição gaussiana.

A flutuação ou ruído nos trabalhos de crescimento possui as mesmas definições empregadas em estudos de difusão. Assim, um ruído branco consiste naquele cujas partículas são depositadas decorrelacionadamente, ou seja, cada deposição não possui relação temporal [17]. Portanto, ruído branco significa dizer que o nosso $\eta(x, t)$ obedece as condições 2.17 e 2.18.

Duas das principais equações diferenciais estocásticas são a equação de Edwards-Wilkinson (EEW)[1], equação de crescimento linear, e por isso possui apenas termos lineares da equação generalizada 2.16, e a equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [22], equação de crescimento não-linear.

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(x, t) \quad (EEW) \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(x, t) \quad (KPZ) \quad (2.20)$$

Dentre as duas equações acima, a Equação de EW é mais simples de se manipular, principalmente por sua linearidade, o que não é o caso da equação de KPZ. Estas duas equações possuem expoentes de crescimento distintos e representam respectivamente suas próprias classes de universalidade, conforme mostrado na tabela 2.1. Só que a Classe de KPZ é amplamente mais estudada e debatida pela comunidade acadêmica, gerando um maior interesse e atenção, mas sob o gargalo da complexidade de sua equação. Daí surgiu-nos a proposta deste trabalho, será possível obtermos a classe de universalidade de KPZ através de uma equação de Edwards-Wilkinson modificada? Por enquanto, não podemos responder a este questionamento, para isto precisamos conhecer a fundo a EEW e suas formas de solução. O ponto de partida, próximo capítulo, será a obtenção dos expoentes de escala pelo método mais simples e mais conhecido, o método das reescalas. Mas antes disso, vamos conhecer a equação em questão.

Equação de Edwards-Wilkinson - EEW

EEW (2.19) é a forma mais simples de uma equação de crescimento estocástico. Carrega este nome porque foi proposta por Edwards e Wilkinson em 1982 [1], onde buscou-se modelar a evolução de interfaces rugosas. EEW é obtida da forma generalizada (2.16), e como estamos em um sistema assintótico, consideramos os valores limítrofes ($t \rightarrow \infty$ e $x \rightarrow \infty$) das funções que caracterizam a superfície. Neste limite, as derivadas de maior ordem em 2.16 tornam-se menos significantes que as derivadas de menor ordem, o que pode ser observado, por argumentos de escala. Isto se verifica, porque para o limite hidrodinâmico os termos de derivadas de maior ordem, tendem a zero mais rapidamente que os de menor ordem. Com isso, a equação 2.16, possui um único termo $\nabla^2 h$ (da parte determinística) que é significativa para a equação. E assim, a equação mais simples, capaz de descrever o crescimento respeitando os princípios de simetria é a EEW.

Abaixo, colocamos algumas características da EEW:

1. Tem-se a mesma forma da equação de difusão, sendo a única diferença a presença do termo estocástico $\eta(x, t)$. Se o ruído é omitido, assim como na equação de difusão, ela gradualmente elimina as irregularidades na interface do crescimento.
2. Conserva a altura média $\bar{h}(t)$, e o fluxo de partículas do sistema é uniforme e constante.
3. O termo ν , chamado de “tensão superficial”, é uma constante que tende a suavizar a interface do crescimento. A figura 2.6, mostra o comportamento da tensão superficial sobre uma curva $h(x, t)$. Quanto maior for ν , mais rápido ocorre a suavização do sistema.

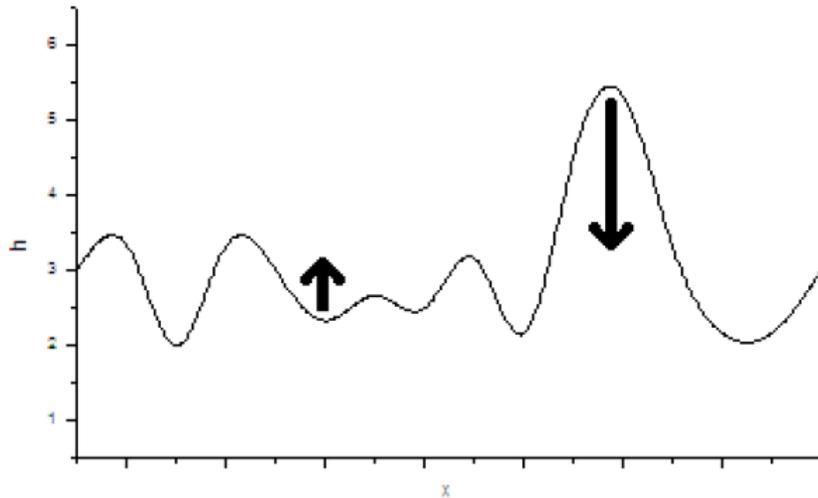


Figura 2.6: Efeito da tensão superficial sobre a interface. Extraído de [17]

A tensão superficial suaviza a curva da seguinte forma, quando há formação de um “pico” este termo tende a trazê-la para valores próximos da altura média, e quando há uma formação de “vale”, o termo tem o mesmo comportamento, ou seja, quanto maior ν , mais próximo da média ocorrerá a flutuação do crescimento da interface.

A equação pode ser resolvida por transformadas de Fourier (TF) [2] ou por métodos de argumentos de escala [15]. No capítulo 3, obteremos os expoentes de crescimento por reescalas e no capítulo seguinte reaplicaremos o método na EEW com memória, com intenção de obtermos uma possível mudança na classe de universalidade. Terminado a resolução por reescalas, nos capítulos seguintes estudaremos a solução analítica da equação.

Capítulo 3

Equação de Edwards-Wilkinson - EEW e resolução por reescalas

No estudo da morfologia de superfícies e interfaces de crescimento, temos um especial interesse em determinar os expoentes de crescimento que representam as características físicas mais essenciais dos modelos. Outra abordagem usada é o estudo da geometria fractal, por meio da determinação da dimensão fractal dos agregados, bem como sua relação com os conceitos de escala e com as leis de potência usados para descrever a morfologia do crescimento de superfícies.[12].

Neste capítulo, por meio de ajustes de escalas e transformadas de Fourier, determinaremos os expoentes de crescimento para o modelo aqui proposto, e conseqüentemente a classe de universalidade a qual pertence. O método das reescalas é a forma mais simples e conhecida de se obter os expoentes de crescimento e conseqüentemente identificar a classe de universalidade. Este mesmo método será reutilizado na equação de EW com memória, que será apresentada no próximo capítulo.

Recomendamos ao leitor interessado em aprofundar e conhecer aplicações físicas do métodos das reescalas, a leitura de Lara *et. al* [23], onde é apresentado algumas aplicações físicas, tanto na física clássica como também, na quântica, por exemplo para a obtenção da solução da equação de Schrödinger.

O método será utilizado de duas formas: primeiro da maneira convencional, no espaço real. Depois reapplicaremos o método, só que neste caso será aplicado na EEW no espaço de frequências, de início faremos a transformada de Fourier da equação, e aí sim aplicaremos as reescalas na equação para obter os expoentes.

O motivo de utilizarmos este método no espaço de frequência consiste que, em determinadas ocasiões, é mais fácil se trabalhar neste espaço do que no espaço real, como por exemplo na resolução da EEW com memória.

3.1 Reescalas no domínio real

Nesta seção, realizaremos os cálculos para obter os expoentes de crescimento da Equação de Edwards-Wilkinson em 1 dimensão, por reescalas.

Partiremos da equação de EW,

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial x^2} + \eta(x, t) \quad (EEW). \quad (3.1)$$

O primeiro passo é determinarmos qual escala e transformações aplicam-se ao nosso crescimento. Nossa interface de crescimento é auto-afim, permitindo transformações horizontais (em x) e verticais (em h), ou seja, a grandeza x pode ser reescalada como, $x' = bx$, sem variações na EEW. A partir desta reescala em x , obteremos as reescalas para as grandezas h , t , w e para o ruído $\eta(x, t)$ existentes na equação.

Como visto no capítulo anterior, a rugosidade da superfície é definida através da flutuação quadrática média das alturas. O valor da rugosidade w é proporcional a t^β para tempos curtos e proporcional a L^α , para tempos longos. Utilizaremos a definição da rugosidade de saturação w_{sat} , e sua dependência em relação ao coeficiente de saturação α , eq. 2.4.

$$w_{sat} \sim L^\alpha \quad \text{para } t \gg t_{sat},$$

abaixo, relacionamos as reescalas.

Primeiro, realizamos uma mudança de variável de x para L , adequando algumas relações as definições da interface de crescimento,

$$x = bx' \rightarrow L = bL' \quad (3.2)$$

Agora, reescalamos a grandeza L na relação $w_{sat} \sim L^\alpha$ de tal forma que

$$w_{sat} \sim L^\alpha \rightarrow w_{sat} = (bL')^\alpha = b^\alpha L'^\alpha.$$

Daí, como $w'_{sat} \sim L'^\alpha$ temos,

$$w_{sat} = b^\alpha w'_{sat}.$$

Assim, a nova escala em relação a rugosidade w é

$$w = b^\alpha w'. \quad (3.3)$$

Esta nova escala em w será útil para encontrarmos a reescala da variável h . Esta reescala da altura h , é encontrada através da equação da rugosidade, eq. 2.2 definida no capítulo anterior, que depende somente de h , possibilitando a obtenção da reescala para esta grandeza.

Inicialmente elevamos ao quadrado os dois lados da eq. 2.2,

$$w^2 = \frac{1}{N} \sum (h_i - \bar{h})^2. \quad (3.4)$$

Agora substituímos a eq. 3.3 em 3.4, obtendo:

$$b^{2\alpha} w'^2 = \frac{1}{N} \sum (h_i - \bar{h})^2$$

Isolando-se a rugosidade w , encontramos

$$w'^2 = \frac{1}{N} \sum (b^{-\alpha} h_i - b^{-\alpha} \bar{h})^2$$

Como a eq. 3.4 deverá ser invariante na transformação $w = b^\alpha w'$, isto significa dizer que $b^{-\alpha} h_i = h'_i$ e $b^{-\alpha} \bar{h} = \bar{h}$, ou seja,

$$h = b^\alpha h', \quad (3.5)$$

que é a reescala da altura.

Conforme o leitor pode observar, utilizamos para obter as reescalas de w e h a relação de dependência $w_{sat} \sim L^\alpha$, esta rugosidade de saturação w_{sat} ocorre a partir de um certo instante t , ao qual denominamos t_{sat} , e como visto na eq. 2.5, t_{sat} também possui uma relação de dependência $t_x \sim L^z$, com a qual obteremos a reescala do tempo t .

Já sabemos que $L = bL'$, substituindo devidamente em $t_x \sim L^z$ temos

$$t_x \sim L^z \rightarrow t_x = (bL')^z = b^z L'^z$$

Sem prejuízo à expressão acima, podemos usar a relação $t'_x \sim L'^z$, ou seja,

$$t_x = b^z t'_x$$

e portanto

$$t = b^z t' \quad (3.6)$$

Agora, encontraremos a reescala do ruído η por sua equação de correlação 2.18,

$$\langle \eta(x, t) \eta(x^*, t^*) \rangle = 2D \delta(x - x^*) \delta(t - t^*)$$

Utilizando as reescalas de x e t já encontradas em (eqs. 3.2 e 3.6), temos

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

Para o próximo passo usamos a seguinte propriedade da função delta, $\delta(bx) = \frac{1}{b}\delta(x)$, assim:

$$\begin{aligned}\langle \eta(x, t)\eta(x^*, t^*) \rangle &= 2D \frac{1}{b} \delta(x' - x^{*'}) \frac{1}{b^z} \delta(t' - t^{*'}) \\ b^{z+1} \langle \eta(x, t)\eta(x^*, t^*) \rangle &= \underbrace{2D \delta(x' - x^{*'}) \delta(t' - t^{*'})}_{\langle \eta(x', t')\eta(x^{*'}, t^{*'}) \rangle}\end{aligned}$$

O lado direito da expressão é exatamente a equação de correlação do ruído $\eta(x', t')$, e introduzindo o termo b^{z+1} na correlação do ruído $\eta(x, t)$ no lado esquerdo da equação, temos

$$\begin{aligned}b^{z+1} \langle \eta(x, t)\eta(x^*, t^*) \rangle &= \langle \eta(x', t')\eta(x^{*'}, t^{*'}) \rangle \\ \left\langle b^{\frac{z+1}{2}} \eta(x, t) b^{\frac{z+1}{2}} \eta(x^*, t^*) \right\rangle &= \langle \eta(x', t')\eta(x^{*'}, t^{*'}) \rangle.\end{aligned}$$

Aqui podemos verificar a igualdade das correlações, assim o primeiro termo do lado esquerdo é igual ao primeiro termo do lado direito.

$$b^{\frac{z+1}{2}} \eta(x, t) = \eta(x', t')$$

e finalmente,

$$\eta(x, t) = b^{-\frac{z+1}{2}} \eta(x', t') \quad (3.7)$$

E assim, a eq. 3.7 é a reescala do ruído $\eta(x, t)$, que deverá ser invariável na EEW.

E portanto, agora temos as reescalas dos termos $x = bx'$, $h = b^\alpha h'$, $t = b^z t'$ e $\eta(x, t) = b^{-\frac{z+1}{2}} \eta(x', t')$, substituímos a reescala de cada termo na EEW (eq. 3.1), da seguinte maneira:

$$\frac{b^\alpha}{b^z} \frac{\partial h'(x', t')}{\partial t'} = \nu \frac{b^\alpha}{b^2} \frac{\partial^2 h'(x', t')}{\partial x'^2} + b^{-\frac{z+1}{2}} \eta(x', t')$$

A equação acima deverá manter-se invariável em relação a eq. 3.1, por isso eliminaremos algebricamente o termo $\frac{b^\alpha}{b^z}$ do lado esquerdo da equação. Para isso multiplicamos toda equação por $b^{z-\alpha}$

$$\frac{\partial h'(x', t')}{\partial t'} = \nu b^{z-2} \frac{\partial^2 h'(x', t')}{\partial x'^2} + b^{\frac{1}{2}z-\alpha-\frac{1}{2}} \eta(x', t') \quad (3.8)$$

Independente das mudanças de escalas, as equações 3.1 e 3.8 devem ser iguais, comparando-as encontramos os valores dos expoentes z e α , pois o termo $b^{z-2} = 1$, de onde obtemos que $z = 2$. Da mesma forma o termo $b^{\frac{1}{2}z-\alpha-\frac{1}{2}} = 1$, onde obtemos que $\alpha = \frac{1}{2}$.

Utilizando a lei de Family-Vicsek, obtemos também o coeficiente de crescimento β . Portanto,

$$z = 2, \quad \alpha = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{1}{4}$$

Que são os expoentes de crescimento pertencentes a classe de universalidade de Edwards-Wilkinson. Valores encontrados em simulações computacionais, comparados com estes aqui obtidos, comprovam que a equação de Edwards-Wilkinson é a equação de crescimento estocástico correspondente ao modelo de deposição aleatória com relaxação superficial - DARS, visto no capítulo anterior.

3.2 Reescalas no domínio das frequências

Nesta seção aplicaremos o mesmo método da seção anterior, com a diferença que as reescalas serão realizadas no espaço das frequências. Ou seja, realizaremos as reescalas após aplicarmos a Transformada de Fourier - TF na eq. 3.1. Esta maneira é bastante útil em situações onde necessitamos simplificar a equação parcial, como por exemplo, na Equação de Edwards-Wilkinson com memória - EEWM (capítulo seguinte), onde no domínio da frequência, conseguimos trabalhar melhor a equação.

3.2.1 Transformada de Fourier

O primeiro passo é definirmos a notação que adotaremos para a transformada de Fourier nas funções da equação Edwards-Wilkinson, abaixo:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial x^2} + \eta(x, t) \quad \text{EEW} \quad (3.9)$$

Definimos a **transformada de Fourier - TF** de f , como sendo a função F que associa a cada função absolutamente integrável $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a função $\hat{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ definida pela expressão

$$\widehat{f}(w) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-iwt} dt \quad (3.10)$$

A **chamada transformada de Fourier inversa - TFI**, é a função F^{-1} que associa a cada função $\widehat{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ que pertença ao conjunto imagem de F a função absolutamente integrável $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida pela expressão

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(w)e^{iwt} dw \quad (3.11)$$

Assim, isso significa dizer que se f é contínua, então

$$F^{-1}(F(f)) = f$$

Seguiremos a definição acima, apenas tomando o cuidado de fazermos os devidos ajustes de notação, substituindo corretamente a função f por $h(x, t)$ ou $\eta(x, t)$ conforme for o caso.

Relacionaremos todas as possíveis transformadas e suas respectivas inversas em cada função da eq. 3.9:

Primeiramente, utilizaremos a função $h(x, t)$:

A transformada de Fourier de $h(x, t)$ e sua respectiva inversa em relação a variável x ,

$$\begin{aligned} \widehat{h}(k, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} h(x, t)e^{-ikx} dx \\ h(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{h}(k, t)e^{ikx} dk. \end{aligned} \quad (3.12)$$

A mesma TF em relação a variável t ,

$$\begin{aligned} \widehat{h}(x, w) &= \int_{-\infty}^{+\infty} h(x, t)e^{iwt} dt \\ h(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{h}(x, w)e^{-iwt} dw. \end{aligned} \quad (3.13)$$

E por último, a transformada em relação a x e t ,

$$\begin{aligned} \widehat{h}(k, w) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} h(x, t)e^{-i(kx-wt)} dt dx \\ h(x, t) &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{h}(k, w)e^{i(kx-wt)} dw dk. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Aplicando a TF, em relação as varáveis x e t , em cada termo da eq. 3.9, temos:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} e^{iwt} e^{-ikx} dt dx = \\ \nu & \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial x^2} e^{iwt} e^{-ikx} dt dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta(x, t) e^{-i(kx-wt)} dt dx. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Deste ponto, resolveremos separadamente cada integral da equação, calcularemos uma a uma utilizando o método da integração por partes.

Conceito:(Integral por partes)

Da fórmula da derivada do produto de duas funções obtemos um método de integração muito útil, chamado *Integração por Partes*, que é estabelecido da seguinte forma.

Se f e g são duas funções diferenciáveis, então

$$D_x [f(x) \cdot g(x)] = f'(x) \cdot g(x) + f(x) \cdot g'(x)$$

ou equivalentemente

$$f(x) \cdot g'(x) = D_x [f(x) \cdot g(x)] - f'(x) \cdot g(x)$$

Integrando ambos os membros em relação a x , obtemos

$$\int f(x) \cdot g'(x) dx = \int D_x [f(x) \cdot g(x)] dx - \int f'(x) \cdot g(x) dx$$

e escrevemos esta última equação da seguinte forma:

$$\int f(x) \cdot g'(x) dx = f(x) \cdot g(x) - \int f'(x) \cdot g(x) dx$$

que é chamada de **fórmula de Integração por Partes**. Esta fórmula pode ser simplificada com as seguintes substituições,

$$\begin{aligned} u &= f(x) & dv &= g'(x) dx \\ du &= f'(x) dx & v &= g(x) \end{aligned}$$

Resultando numa versão simplificada da fórmula,

$$\int u \cdot dv = u \cdot v - \int v du \quad (3.16)$$

Começaremos a resolução pela integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial h(x,t)}{\partial t} e^{iwt} dt$ que é a primeira integral do lado esquerdo da eq. 3.15, para o cálculo utilizaremos a integração por partes, usando as seguintes mudanças de variáveis,

$$u = e^{iwt}, \quad dv = \frac{\partial h(x,t)}{\partial t}, \quad du = iwe^{iwt}, \quad v = h(x,t)$$

Aplicamos a definição de integral por partes (eq. 3.16):

$$|e^{iwt} h(x,t)|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} h(x,t) iwe^{iwt} dt = 0 - iw \int_{-\infty}^{+\infty} h(x,t) e^{iwt} dt$$

Percebemos que de acordo com eq. 3.13, a integral resultante é a própria transformada de Fourier $\widehat{h}(x, w)$. Portanto,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial h(x,t)}{\partial t} e^{iwt} dt = -iw \int_{-\infty}^{+\infty} h(x,t) e^{iwt} dt = -iw \widehat{h}(x, w) \quad (3.17)$$

Repetimos o método de integração para a integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 h(x,t)}{\partial x^2} e^{-ikx} dx$, que também faz parte da equação 3.15:

$$u = e^{-ikx}, \quad dv = \frac{\partial^2 h(x,t)}{\partial x^2}, \quad du = -ike^{-ikx}, \quad v = \frac{\partial h(x,t)}{\partial x}$$

Integrando por partes:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 h(x,t)}{\partial x^2} e^{-ikx} dx = \left| e^{-ikx} \frac{\partial h(x,t)}{\partial x} \right|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial h(x,t)}{\partial x} (-ik) e^{-ikx} dx = ik \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial h(x,t)}{\partial x} e^{-ikx} dx$$

Reaplicando o método da integração por partes na integral resultante temos,

$$ik \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial h(x,t)}{\partial x} e^{-ikx} dx = ik(ik) \int_{-\infty}^{+\infty} h(x,t) e^{-ikx} dx$$

De acordo com a eq. 3.12, a integral é a própria transformada de Fourier $\widehat{h}(k, t)$. Portanto,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 h(x,t)}{\partial x^2} e^{-ikx} dx = ik(ik) \int_{-\infty}^{+\infty} h(x,t) e^{-ikx} dx = -k^2 \widehat{h}(k, t) \quad (3.18)$$

O último termo da equação 3.15, ao qual encontra-se o ruído $\eta(x, t)$, depende de x e t , aplicaremos a definição da transformada de Fourier duas vezes (em x e t):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta(x, t) e^{-i(kx-wt)} dx dt = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \eta(x, t) e^{-ikx} dx \right] dt.$$

Utilizamos a definição da transformada de Fourier em relação a x :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \eta(x, t) e^{-ikx} dx \right] dt = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt} \hat{\eta}(k, t) dt,$$

e agora em relação a t ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt} \hat{\eta}(k, t) dt = \hat{\eta}(k, w).$$

E assim,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta(x, t) e^{-i(kx-wt)} dx dt = \hat{\eta}(k, w) \quad (3.19)$$

Substituindo (3.17), (3.18) e (3.19) em (3.15), temos:

$$-i w \hat{h}(x, w) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} dx = -\nu k^2 \hat{h}(k, t) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt} dt + \hat{\eta}(k, w),$$

rearranjando as integrais:

$$-i w \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{h}(x, w) e^{-ikx} dx}_{\hat{h}(k, w)} = -\nu k^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{h}(k, t) e^{iwt} dt}_{\hat{h}(k, w)} + \hat{\eta}(k, w),$$

A primeira integral é igual $\hat{h}(k, w)$ que corresponde a TF de $\hat{h}(x, w)$ em relação a x . E a segunda integral também é igual a $\hat{h}(k, w)$ que corresponde a TF de $\hat{h}(k, t)$ em relação a t , organizando a equação em função de $\hat{h}(k, w)$, temos:

$$\hat{h}(k, w) = \frac{\hat{\eta}(k, w)}{\nu k^2 - iw} \quad (3.20)$$

Esta é a equação de EW no domínio das frequências, e dos momentos.

3.2.2 Relações de escala

Agora que encontramos a EEW no domínio das frequências. Faremos as mudanças de escalas em cada termo da equação 3.20. Para isto utilizaremos as equações de reescalas já encontradas na seção anterior, e calcularemos as reescalas ainda desconhecidas.

Lembrando que para todas as reescalas encontradas, partimos da reescala $x = bx'$, deste ponto encontraremos também as relações das variáveis e funções originadas da equação de EW após a Transformada de Fourier, no caso, k, w, \hat{h} e $\hat{\eta}$.

Iniciaremos pela TF da altura:

$$\widehat{h}(k, w) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} h(x, t) e^{-ikx} e^{iwt} dx dt$$

Nosso objetivo é encontrar uma reescala para esta função. Para isto substituímos as reescalas já conhecidas (eqs. 3.2, 3.6 e 3.5):

$$\widehat{h}(k, w) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikbx'} e^{iwb^z t'} b^\alpha h'(x', t') b dx' b^z dt'$$

Retiramos da integral todos os termos que não dependem de x' e t' ,

$$\widehat{h}(k, w) = b^{\alpha+z+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ibkx'} e^{ib^z wt'} h'(x', t') dx' dt'$$

A função $\widehat{h}(k, w)$ não deve sofrer variações com as reescalas, para esta garantia devemos encontrar uma reescala para k e w , de tal forma que se mantenha a definição da TF, ou seja, k deve ser reescalado como $k' = bk$, ou,

$$k = \frac{k'}{b} \quad (3.21)$$

e w como $w' = b^z w$, ou,

$$w = \frac{w'}{b^z} \quad (3.22)$$

Portanto, $\widehat{h}(k, w)$ será

$$\widehat{h}(k, w) = b^{\alpha+z+1} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik'x'} e^{i w' t'} h'(x', t') dx' dt'}_{\widehat{h}'(k', w')}.$$

A integral resultante é exatamente a transformada de Fourier de $\widehat{h}'(k', w')$. Com a devida substituição, temos a reescala da altura no domínio das frequências:

$$\widehat{h}(k, w) = b^{\alpha+z+1} \widehat{h}'(k', w') \quad (3.23)$$

Para encontrar a reescala do ruído no espaço de frequência $\widehat{\eta}(k, w)$, seguiremos os mesmos passos de $\widehat{h}(k, w)$. Assim, iniciamos pela TF do ruído $\widehat{\eta}(k, w)$:

$$\widehat{\eta}(k, w) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \eta(x, t) e^{-ikx} e^{iwt} dx dt$$

Substituímos as reescalas já conhecidas (eqs. 3.2, 3.6, 3.7, 3.21 e 3.22):

$$\widehat{\eta}(k, w) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i \frac{k'}{b} bx'} e^{i \frac{w'}{b^z} b^z t'} b^{-\frac{z+1}{2}} \eta'(x', t') b dx' b^z dt'$$

Retiramos da integral todos os termos que não dependem de x' e t' ,

$$\widehat{\eta}(k, w) = b^{\frac{z}{2} + \frac{1}{2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik'x'} e^{iw't'} \eta'(x', t') dx' dt'}_{\widehat{\eta}'(k', w')}$$

A integral resultante é exatamente a TF de $\widehat{\eta}'(k', w')$. Portanto a reescala do termo $\widehat{\eta}(k, w)$ é:

$$\widehat{\eta}(k, w) = b^{\frac{z}{2} + \frac{1}{2}} \widehat{\eta}'(k', w'). \quad (3.24)$$

3.2.3 Obtenção dos expoentes de crescimento

Voltamos a equação de crescimento (eq. 3.20),

$$\widehat{h}(k, w) = \frac{\widehat{\eta}(k, w)}{\nu k^2 - iw}$$

Substituímos as reescalas (eqs. 3.21, 3.22, 3.23 e 3.24), obtendo,

$$b^{\alpha+z+1} \widehat{h}'(k', w') = \frac{b^{\frac{z}{2} + \frac{1}{2}} \widehat{\eta}'(k', w')}{\boxed{\nu \frac{k'^2}{b^2} - i \frac{w'}{b^z}}}$$

Observem que apesar das reescalas a equação deve ser invariável, e para que isso aconteça o denominador das duas equações devem ser iguais. Isso só é possível se $z = 2$. Desenvolvendo a expressão com o valor de $z = 2$, temos

$$b^{\alpha - \frac{1}{2}} \widehat{h}'(k', w') = \frac{\widehat{\eta}'(k', w')}{\nu k'^2 - iw'}$$

E agora, comparando novamente com a eq. 3.20, concluimos que $b^{\alpha - \frac{1}{2}} = 1$, ou $\alpha - \frac{1}{2} = 0$, de onde retiramos que $\alpha = \frac{1}{2}$.

E por último, utilizando a lei de Family-Vicsek, obtemos também o coeficiente de crescimento β . E abaixo reescrevemos os coeficiente encontrados,

$$z = 2, \quad \alpha = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{1}{4}.$$

Que são os expoentes de crescimento pertencentes a classe de universalidade de Edwards-Wilkinson.

Neste capítulo, utilizando o método das reescalas de duas maneiras distintas, obtemos os expoentes críticos do crescimento de EW. Este método mostrou-se bastante eficiente e de simples resolução, com este mesmo propósito, no capítulo seguinte reaplicaremos a metodologia para a equação de EW com memória. Desta forma poderemos analisar o comportamento dos coeficientes de crescimento com a inserção da função memória a EEW.

Capítulo 4

Equação de Edwards-Wilkinson com memória - EEWM e resolução por reescala

Sabemos que a equação de Edwards-Wilkinson devido aos seus expoentes de crescimento pertence a classe de universalidade de EW. Neste capítulo, realizaremos uma pequena mudança na EEW, alterando o termo de derivada segunda do espaço, criando assim uma generalização da EEW. O objetivo disso é mudarmos a dinâmica do crescimento, o que alteraria os coeficientes de escala, migrando assim a equação para novas classes de universalidade, como por exemplo, para a classe de KPZ. Isto significaria a obtenção de uma equação linear para a classe de universalidade de KPZ, possibilitando a abertura de um leque de opções em diversas áreas onde são estudados estes crescimentos, e que encontramos dificuldades inerentes da equação atual (eq. 2.20), que é não-linear e estocástica.

4.1 Equação de Edwards-Wilkinson com memória - EEWM

Diversos sistemas possuem uma evolução no tempo utilizando informações de períodos imediatamente anteriores. Esses sistemas são chamados de sistemas markovianos, e grande parte das equações da Física e seus modelos são markovianos. A equação de Edwards-Wilkinson é uma equação markoviana, pois sua dinâmica para o tempo $t + dt$ requer informações de alturas e flutuações do instante imediatamente anterior, no caso, do tempo t .

Porém, diversos sistemas e fenômenos possuem uma evolução que necessitam de informações mais antigas, ou seja, uma variação no tempo $t + dt$ utiliza

informações de configurações e relações dos instantes t , $t-dt$, $t-2dt$, $t-3dt$, etc. Esses sistemas são ditos possuírem uma *memória*, onde informações do passado continuam a influenciar *explicitamente* o comportamento do sistema. Diversos fenômenos possuem suas dinâmicas dependentes de memória e podemos citar sistemas de vidros de spin, plasmas, sistemas biológicos etc.

O estudo de sistemas com memória em processos difusivos teve um grande desenvolvimento a partir do trabalho de Hazime Mori, em 1964 [24] e [25]. Mori propôs uma generalização da equação de Langevin, e nesta proposta agregou os casos que existissem relações não-markovianas, ou seja, os processos atuais passariam a não depender apenas de ocorrências imediatamente anteriores.

Como diversos crescimentos se desenvolvem em meios cuja dinâmica é orientada por memória optamos por estudar algumas propriedades da função memória em equações de crescimento. Inspirando-se na ideia de Mori para a equação de Langevin, escreveremos a equação de Edwards-Wilkinson com uma função memória no termo de tensão superficial. Assim, substituímos a constante ν , presente em EEW, por uma função $\nu(t)$ que chamaremos de *função memória*. Abaixo apresentamos a Equação de Edwards-Wilkinson com memória - EEWM:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \int_0^t \nu(t - \tau) \frac{\partial h^2(x, \tau)}{\partial^2 x} d\tau + \eta(x, t). \quad (4.1)$$

A equação acima significa que, para diversos instantes, a relação entre os primeiros vizinhos representada pelo termo $\frac{\partial h^2(x, \tau)}{\partial^2 x}$, continua a influenciar o crescimento, porém agora com um peso representado pelo termo de tensão superficial $\nu(t)$. O termo com a função memória está descrito por uma integral temporal dependente de uma variável de transição τ , limitada de 0 a t . Esta expressão, é chamada de *convolução* (ver apêndice).

A função memória $\nu(t)$ possui uma grande importância na evolução do crescimento, seguindo a propriedade:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \nu(t) = 0, \quad (4.2)$$

Esta propriedade é bastante plausível, pois quanto mais “antiga” a informação, menos influirá para o momento atual do crescimento.

Na figura 4.1, temos um gráfico com um esboço com diferentes possibilidades para a função memória.

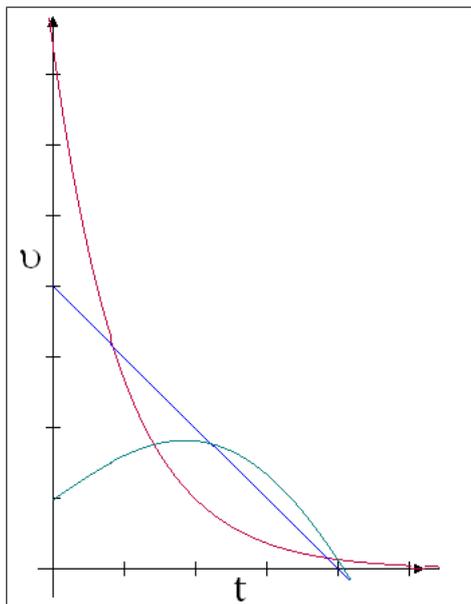


Figura 4.1: Algumas possibilidades para a função memória, para todas quando $t \rightarrow \infty$ o termo $\nu \rightarrow 0$.

O nosso objetivo neste capítulo é analisar, por reescalas, a repercussão da função memória nos expoentes de crescimento. Será possível transitar em diferentes classes de universalidade apenas alterando esta função memória?

4.2 Expoentes de crescimento de EEWM para funções memórias reescaláveis

Nesta seção, realizaremos o cálculo dos expoentes críticos da equação, utilizando a ideia e os conceitos de reescalas. Ao invés de utilizar a EEWM tal como apresentada na eq. 4.1, a utilizaremos com representação no espaço de frequências. Faremos isto por que será mais fácil a manipulação matemática dos termos, já que não haverá mais a integral de convolução. Assim, realizando a transformada de Fourier na eq. 4.1 obtemos

$$-iwh(k, w) = \nu(w) [-k^2 h(k, w)] + \eta(k, w). \quad (4.3)$$

Analisaremos os expoentes de crescimento utilizando uma memória que seja reescalável. Supondo que após a reescala do tempo, $t = b \cdot t'$, seja possível encontrar uma função memória que seja reescalável na seguinte forma:

$$\nu(t) = b^\gamma \nu'(t'). \quad (4.4)$$

onde γ é o expoente de reescala da função memória. A função $\nu(t)$ está no domínio do tempo t , para a utilizarmos na eq. 4.3 é necessário calcular a TF da função memória $\nu(t)$, conforme abaixo,

$$\nu(w) = \int_{-\infty}^{\infty} \nu(t) e^{-iwt} dt.$$

Substituindo as respectivas reescalas de t e w , eqs 3.6 e 3.22, juntamente com a reescala $\nu(t)$ (eq. 4.4), temos

$$\nu(w) = b^{\gamma+z} \int_{-\infty}^{\infty} \nu'(t) e^{-iw't} dt,$$

a integral resultante é exatamente a TF da função $\nu'(t)$, assim

$$\nu(w) = b^{\gamma+z} \nu'(w'), \quad (4.5)$$

que é a reescala da função $\nu(w)$ no domínio de frequência.

Agora que conhecemos as reescalas dos termos k , w , h , η e ν da eq. 4.3 apresentadas respectivamente pelas eqs (3.21, 3.22, 3.5, 3.7 e 4.5), podemos inserir cada nova escala na eq. 4.3 e assim obter

$$-i \frac{w'}{b^z} b^{\alpha+z+1} h'(k', w') = -b^{\gamma+z} \nu'(w') \frac{k'^2}{b^2} b^{\alpha+z+1} h'(k', w') + b^{\frac{z}{2}+\frac{1}{2}} \eta'(k', w'),$$

e realizando os devidos cálculos e simplificações,

$$-iw' h'(k', w') = -b^{2z-2+\gamma} (\nu'(w') k'^2 h'(k', w')) + b^{\frac{z}{2}-\alpha-\frac{1}{2}} \eta'(k', w'). \quad (4.6)$$

Como vimos anteriormente, As reescalas preservam as características do crescimento e conseqüentemente a sua equação, isto significa que o resultado encontrado deverá permanecer inalterado em relação a equação 4.3, fornecendo-nos duas novas equações a seguir:

$$b^{2z-2+\gamma} = 1 \text{ e } b^{\frac{z}{2}-\alpha-\frac{1}{2}} = 1.$$

De onde temos que

$$z = 1 - \frac{\gamma}{2} \text{ e } \alpha = -\frac{1}{4}\gamma. \quad (4.7)$$

E assim temos os expoentes α e z , em função do parâmetro γ da memória. Este resultado mostra que a função memória inserida na EEW pode modificar

os expoentes de crescimento. É um resultado até certo ponto poderoso, pois prova-nos a possibilidade de transitar por classes de universalidade distintas.

Tendo posto este resultado, surge-nos um questionamento. Representada por uma equação diferencial estocástica não-linear, a classe de universalidade de KPZ é bastante conhecida e explorada. Isto nos instiga a seguinte consideração: será possível, com uma determinada função memória na EW (equação linear), migrarmos para a classe de universalidade de KPZ?

Na prática o surgimento de uma função memória pode ocorrer por meio da inclusão de um solvente ou reagente químico que modifica a dinâmica da interface de crescimento, estabelecendo relações diferenciadas entre os sítios envolvidos no processo. A inclusão, por exemplo, de materiais viscosos e fluido magnéticos, nos levar a supor que podemos alterar a dinâmica do crescimento de EW, e esta alteração pode está associada a função memória.

4.2.1 Parâmetro gama e classe de universalidade de KPZ

Refletindo a respeito desta questão, vamos refazer nosso questionamento de outra forma: é possível um valor para γ , tal que obtenha-se uma função memória do tipo rescalável em que a equação de crescimento migre para a classe de universalidade de KPZ?

Para responder esta pergunta, basta verificar se os expoentes de crescimento de KPZ, estão dentro do conjunto solução do sistema de equações a seguir

$$\begin{cases} z = 1 - \frac{\gamma}{2} \\ \alpha = -\frac{1}{4}\gamma \end{cases} \quad (4.8)$$

E escrevendo z em função de α , obtemos a seguinte relação,

$$z = 2\alpha + 1. \quad (4.9)$$

Sabendo que os coeficientes de crescimento de KPZ, $\alpha = \frac{1}{2}$ e $z = \frac{3}{2}$, não seguem a relação, concluímos que não existe uma função memória do tipo $\nu(t)$ rescalável, que torne a equação de crescimento (4.1), um crescimento da classe de universalidade de KPZ. Este fato não prova definitivamente que não podemos migrar para KPZ, pois a função memória do tipo $\nu(t)$ está atrelada ao fato de ser rescalável na forma $\nu(t) = b^\gamma \nu'(t)$. Assim, podem existir outras memórias não abrangidas nesta situação.

4.2.2 Propostas de algumas funções memórias reescaláveis

Analisaremos algumas funções memórias do tipo $\nu(t)$ reescalável e discutiremos possíveis resultados. As possibilidades de funções $\nu(t)$ são bem restritas, pois além da propriedade mostrada na eq. 4.2, a função memória também deverá ser suscetível a reescala da forma $b^\gamma \nu'(t)$, restringindo ainda mais as opções. Vejamos algumas propostas:

► $\nu(t) = \nu \cdot \delta(t)$

Neste caso, a função memória é $\nu(t) = \nu \cdot \delta(t)$, sendo ν uma constante. Esta função memória chama a atenção por conter a função delta de Dirac, $\delta(t)$, uma função identidade na convolução (ver apêndice B.6). Pelas características da função delta de Dirac, a memória atuará instantaneamente, apresentando valores apenas para $t = 0$. O “peso” da memória será a constante ν , e será dada em forma de “pulsos”. Para elucidar o comportamento da função, encontraremos os expoentes da EEW para este caso. Para isso, reescalamos $\nu(t) = \nu \cdot \delta(t)$, utilizando a já conhecida reescala do tempo, $t = b^z t'$, da seguinte forma:

$$\nu \cdot \delta(t) = \nu \cdot \delta(b^z t'),$$

por propriedade do delta, tem-se

$$\nu \cdot \delta(t) = \frac{\nu}{b^z} \delta(t'). \quad (4.10)$$

Por hipótese, temos que $\nu(t) = b^\gamma \nu'(t)$, comparando com a equação acima (eq. 4.10), temos que o parâmetro γ vale $-z$, e conseqüentemente pelas eqs. (4.8 e 4.9), temos que

$$z = 2 \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{1}{2},$$

ou seja, a função memória $\nu \cdot \delta(t)$ conserva os expoentes críticos do crescimento, então podemos dizer que esta função é uma caso particular para a EEW sem memória. E com isso, obtemos uma outra forma de encontrarmos os expoentes críticos da EEW, e mais, mostra-nos que a função memória delta de Dirac mantém a mesma correlação entre as partículas vizinhas da interface de crescimento.

► $\nu(t) = 1$

Agora analisaremos a função memória unitária: $\nu(t) = 1$. A função memória unitária é importante, pois nos mostra o comportamento da memória com “pesos” iguais para períodos imediatamente anteriores e períodos mais antigos. Memórias antigas atuam com a mesma carga que as memórias recentes.

Nesta função, a reescala do tempo t para t' , conserva a escala original de $\nu(t)$, sendo assim, $\nu(t) = \nu(t')$.

Daí, encontramos $\gamma = 0$ e utilizando as eqs. (4.8 e 4.9), encontramos os seguintes resultados para z e α :

$$z = 1 \quad \text{e} \quad \alpha = 0.$$

De um ponto de vista matemático, a única informação que podemos extrair destes expoentes, sabendo que para tempos longos vale a relação $w_{sat} \sim L^\alpha$, é que para $\alpha = 0$ conclui-se que a saturação independe de L . No capítulo 6, após a resolução analítica, voltaremos a tratar desta função, buscando maiores informações na rugosidade.

► $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$

Um outro exemplo de função memória que se enquadra em nossas condições é $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$, para $0 < n < 2$. Esta função atende nossos pré-requisitos, é possível reescalá-la e a função memória tende a zero quando $t \rightarrow \infty$. Abaixo, temos a fig. (4.2), que fornece o gráfico de $\nu(t)$, para n diversos.

Utilizando a reescala no tempo t , $t = b^z t'$, reescalamos $\nu(t)$:

$$\nu(t) = \frac{1}{t^n} = \frac{1}{(b^z t')^n},$$

sabendo que $\nu(t') = \frac{1}{t'^n}$, tem-se,

$$\nu(t) = b^{-nz} \nu(t').$$

Por hipótese, temos que $\nu(t) = b^\gamma \nu(t')$. Assim, nosso parâmetro $\gamma = -nz$, e conseqüentemente utilizando as eqs. (4.8 e 4.9), temos

$$z = \frac{2}{2-n} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{n}{4-2n}. \quad (4.11)$$

Analisando o gráfico, na fig. 4.3, o resultado mostra que a memória modifica a relação existente entre os sítios vizinhos de uma interface, ou

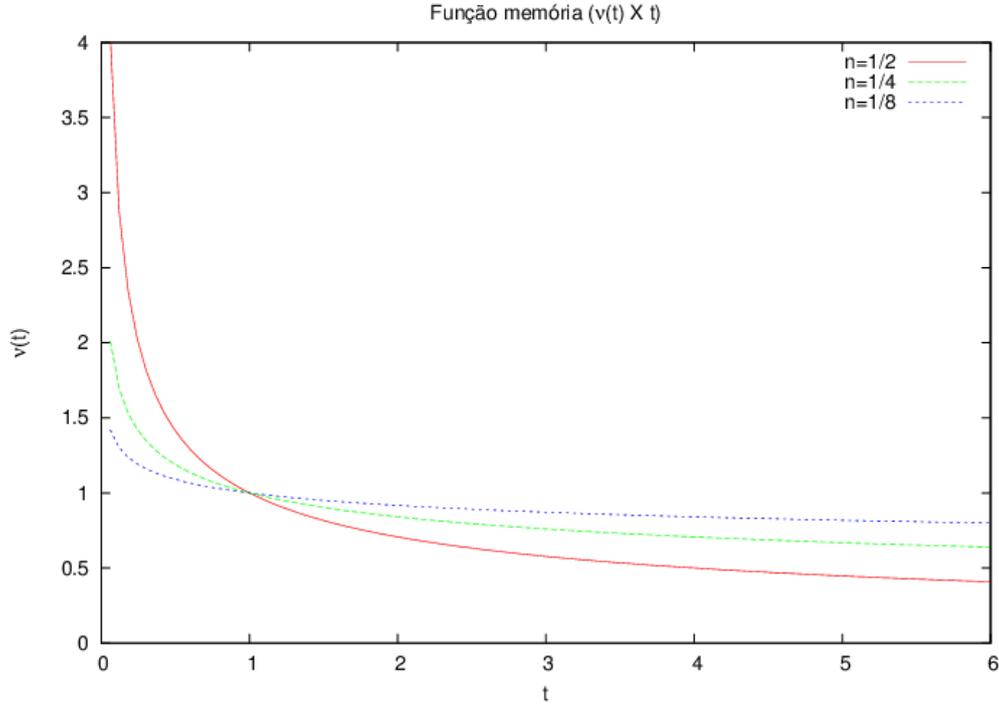


Figura 4.2: Gráfico da função memória $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$, com 3 possíveis valores de n .

seja, altera a carga de influência do termo $\frac{\partial h^2(x,\tau)}{\partial^2 x}$ na Equação de Edwards-Wilkinson com memória, provando que com inserção de uma memória, é possível transitar por diferentes classes de universalidade.

Como os expoentes estão escritos sob a dependência da variável n , isto possibilita que realizemos o cálculo inverso, por exemplo, qual será a função memória na forma $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$ que possui o expoente dinâmico z igual a 2? Esta resposta é adquirida simplesmente substituindo z na eq. 4.11. Neste caso obtemos $n = 1$, e conseqüentemente pela segunda expressão, $\alpha = \frac{1}{2}$. e aí respondemos a questão: a função memória $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$, com $n = 1$, mantém o expoente dinâmico z e o expoente de saturação α da EEW inalterados.

A parametrização de α e z da EEWM com função memória $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$, possibilita-nos inúmeras alterações nos expoentes de crescimento (e, conseqüentemente na classe de universalidade). Isto nos credencia a navegar por diferentes pesquisas e estudos na área de crescimentos de superfícies. Em um paralelo à pesquisas e modelos de crescimentos que possam ser utilizados por esta equação, nos concentramos na área de Ciência de Materiais, onde

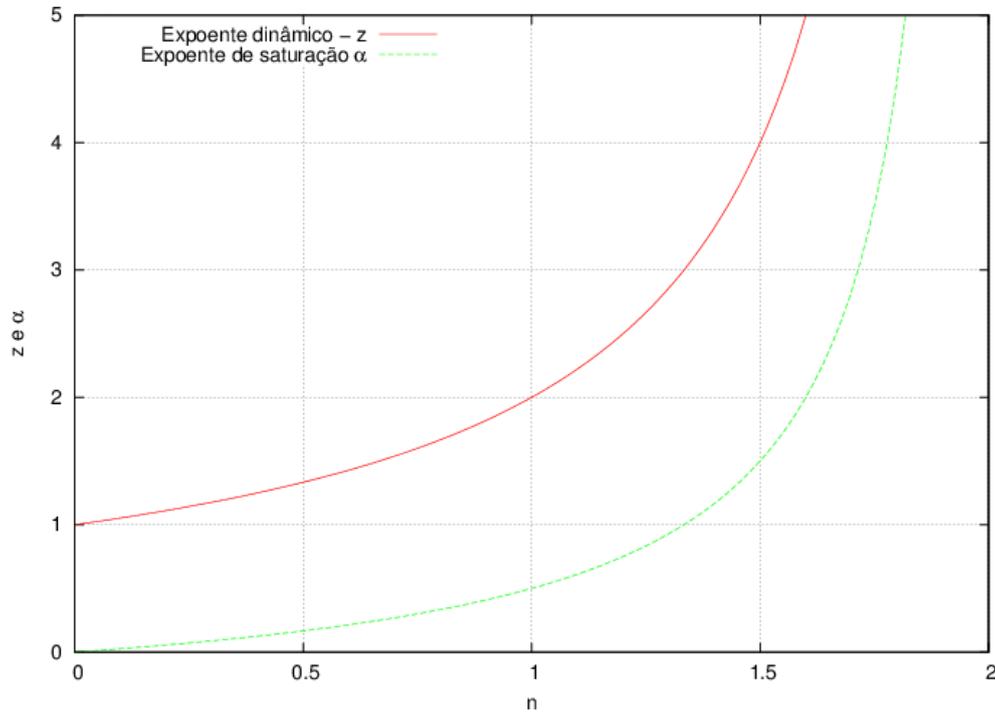


Figura 4.3: Mostra-se a evolução dos expoentes α e z em relação a variável n da função memória $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$.

encontra-se aplicação, principalmente em crescimento epitaxial.

Crescimento epitaxial é o crescimento de uma camada sobre um substrato cristalino de mesma substância ou não, gerando um filme fino. Estes filmes são utilizados principalmente na construção de peças e materiais semicondutores¹. O processo de crescimento destes filmes finos, geradores destes materiais, influenciam diretamente na qualidade e eficiência do material, existem diversas técnicas destes processos, como LPE, VPE, MBE e HWE [27]. Há alguns modelos computacionais, discretos e contínuos criados especificamente para este tipo de crescimento, dentre alguns, podemos citar o modelo de Volmer-Weber [28], o de Ferreira e Ferreira [29], e Das Sarma-Tamborenea [30]. Estes modelos são utilizados para modelar processos de crescimentos de filmes finos e pertencem a classe de universalidade de Mullins-Herring, que possui os seguintes expoentes de crescimento(para dimensão 1+1) [15]:

¹Semicondutores são materiais de média condutividade elétrica, mas com o aumento de temperatura torna-se um excelente condutor. [26]

$$\alpha = \frac{3}{2}, \quad \beta = \frac{3}{8}, \quad z = 4.$$

Observando estes expoentes notamos que conseguimos obtê-los, substituindo n , na equação parametrizada de z e α (eq. 4.11), por $\frac{3}{2}$. Este fato mostra que a equação de Edwards-Wilkinson com memória, $\nu(t) = \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}}$, pertence a classe de Mullins-Herring, e a mesma pode ser utilizada, como modelo contínuo, em estudos de crescimentos epitaxiais.

Neste capítulo, mostramos que a função memória analisada, reescalável da forma $\nu(t) = b^\gamma \nu'(t)$, pode modificar a dinâmica e a classe de universalidade do crescimento. Encontramos também uma função memória que representa um caso particular para a EEW sem memória. Esta informação nos será útil, como mostraremos mais adiante, pois fornece-nos mais uma opção para calcularmos a solução exata da equação de Edwards-Wilkinson. Abaixo, temos uma tabela, com as três funções memórias trabalhadas no método das reescalas, juntamente com seus respectivos expoentes e classes de universalidade correspondentes.

Função memória	expoentes	Classe/modelo
$v(t) = v \cdot \delta(t)$	$z = 2$ e $\alpha = \frac{1}{2}$	<i>Edwards – Wilkinson</i>
$v(t) = 1$	$z = 1$ e $\alpha = 0$	\nexists
$v(t) = \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}}$	$z = 4$ e $\alpha = \frac{3}{2}$	<i>Mullins – Herring</i>

Tabela 4.1: Funções memórias utilizadas no método das reescalas.

Agora, partiremos para uma análise analítica da Equação de EW com memória, uma eventual resolução da equação, nos possibilitará encontrar funções memórias sem as restrições que tínhamos no método das reescalas. E para isto, já no capítulo seguinte, o primeiro passo será conhecermos a resolução analítica da EEW, para com isso reapplicarmos a mesma solução para a equação com memória.

Capítulo 5

Resolução analítica da Equação de Edwards-Wilkinson

Para resolvermos analiticamente a Equação de Edwards-Wilkinson com memória, primeiro faz-se necessário entendermos a resolução da própria EEW. E grande parte da bibliografia que trata do assunto cita o artigo do Nattermann *et. al.* [2], onde foi desenvolvida a resolução por transformadas de Fourier. Seguimos partes da ideia de Nattermann sem deixar de lado nossa própria contribuição e desenvolvimento para o cálculo. Mais a frente, este capítulo será espelho na solução da equação de EW com memória.

5.1 Solução da Equação de Edwards-Wilkinson

Aqui, encontraremos os expoentes de crescimento da equação de Edwards-Wilkinson através da sua resolução analítica. Ao decidirmos estudar os expoentes críticos de equações de Edwards-Wilkinson generalizadas, como nos casos de inclusão de memória, nos deparamos com a necessidade de conhecer a formulação matemática para a obtenção dos expoentes da EEW de forma analítica (e não somente por escalas). A tarefa parecia bem simples e já assimilada pela comunidade. Ao procurarmos os trabalhos mais citados e conhecidos a respeito da equação de crescimento de Edwards-Wilkinson, inclusive em clássicos como o livro do Barabasi e Stanley [15], percebemos que praticamente todos os trabalhos citam o artigo de Nattermann *et al* [2] como sendo a fonte para a resolução analítica da EEW. Ao estudarmos o trabalho de Nattermann nos deparamos com uma resolução truncada, resumida, pouco didática e extremamente complicada. Neste sentido, decidimos refazer os cálculos da resolução exata da EEW, porém seguindo, em vários processos, um caminho original. No próximo capítulo, ainda simplificaremos

a resolução da EEW ao incluir a função memória. Neste capítulo apresentaremos a nossa formulação de forma detalhada. A partir desta resolução, teremos condições de trabalhar em equações mais generalizadas.

Partindo da equação de Edwards-Wilkinson 2.19,

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

vimos, no cap. 2, que algumas equações parciais estocásticas, inclusive a EEW, obedecem a relação de Family-Vicsek (eq. 2.8):

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

Nosso objetivo aqui é encontrar uma relação da rugosidade $w(L, t)$ em função de $f\left(\frac{t}{L^z}\right)$ e L^α , para assim, comparar a relação encontrada com a relação de Family-Vicsek, permitindo-nos encontrar os expoentes de crescimento α , β e z .

O ponto de partida para realização do cálculo será a definição de rugosidade apresentada no cap. 2.

5.2 Rugosidade

Na eq. 2.2, definimos a rugosidade $w(L, t)$ da seguinte forma,

$$w(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{x=1}^L (h(x, t) - \bar{h}(t))^2},$$

a fim de eliminar o radical elevamos ao quadrado os dois lados da equação,

$$w^2(L, t) = \frac{1}{L} \sum_{x=1}^L (h(x, t) - \bar{h}(t))^2. \quad (5.1)$$

Resolvemos a potência ao quadrado e distribuímos o \sum para cada termo da expressão,

$$w^2(L, t) = \frac{1}{L} \sum_{x=1}^L h(x, t)^2 - \bar{h}(t) \frac{2}{L} \sum_{x=1}^L h(x, t) + \bar{h}(t)^2 \frac{1}{L} \sum_{x=1}^L 1$$

A altura média é a soma de todas as alturas $h(x, t)$, em cada sítio x em um determinado tempo t , dividido pelo tamanho do substrato L . Por isso o termo $\frac{1}{L} \sum_{x=1}^L h(x, t)$ é exatamente a altura média $\bar{h}(t)$, e sabemos também que $\sum_{x=1}^L 1 = L$, portanto

$$w^2(L, t) = \frac{1}{L} \sum_{x=1}^L h(x, t)^2 - \bar{h}(t)^2$$

$$w^2(L, t) = \langle h(x, t)^2 \rangle - \langle h(t) \rangle^2, \quad (5.2)$$

em que $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre o ensemble (para todos os x 's).

5.2.1 Na EEW, a média das alturas.

Mostraremos abaixo que o termo $\langle h(t) \rangle^2$ é nulo, e isto é verificado através do cálculo da velocidade média da altura h . Se a velocidade média de h é nula, então $\langle h(t) \rangle$ também o será.

Calculamos a velocidade média das alturas h , através da equação estocástica generalizada, eq. 2.14, para um determinado tempo t .

$$\left\langle \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} \right\rangle = \nu \left\langle \frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial^2 x} \right\rangle + \langle \eta(x, t) \rangle = \nu \frac{\partial^2}{\partial^2 x} \langle h(x, t) \rangle + \langle \eta(x, t) \rangle = \nu \frac{\partial^2 \bar{h}(t)}{\partial^2 x} + \langle \eta(x, t) \rangle,$$

$$\left\langle \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} \right\rangle = \langle \eta(x, t) \rangle,$$

o que significa que a velocidade média da interface de crescimento depende exclusivamente da média dos ruídos $\eta(x, t)$.

Usando a propriedade do ruído η , dada pela eq. (2.17),

$$\left\langle \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} \right\rangle = 0.$$

A velocidade média da altura para uma determinada posição x é nula. Definimos a velocidade média para toda a interface de tamanho L , como,

$$v = \frac{1}{L} \int_0^L dx \left\langle \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} \right\rangle = 0,$$

e conseqüentemente $\langle h(t) \rangle^2 = 0$.

Assim, a rugosidade ao quadrado, eq. 5.2, pode ser escrita como

$$w^2(L, t) = \langle h(x, t)^2 \rangle,$$

ou ainda,

$$w^2(L, t) = \langle h(x, t)h(x, t) \rangle. \quad (5.3)$$

Acima temos uma equação que expressa uma relação entre w e $h(x, t)$.

5.3 Cálculo da rugosidade usando o espaço de frequências

Na seção 3.2, determinamos a EEW para o domínio das frequências eq. 3.20, conforme a seguir.

$$\hat{h}(k, w) = \frac{\hat{\eta}(k, w)}{\nu k^2 - iw}.$$

A altura h nas eqs. 5.3 e 3.20, estão representados em domínios distintos, na primeira a variável h está no espaço real, e na segunda, h se encontra no espaço de frequências. Isto nos possibilita dois caminhos, encontrarmos a função correlação das alturas no espaço de frequência ou no espaço real. Trabalharemos no espaço de frequências, pois neste espaço a EEW torna-se mais compacta possibilitando manipulá-la com mais facilidade.

Para isso realizamos a transformada de Fourier em relação a x na eq. 5.3, onde obtemos a seguinte expressão,

$$w^2(L, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \hat{h}(k, t)\hat{h}(k', t) \rangle e^{i(k+k')x} dk dk'. \quad (5.4)$$

O próximo passo é calcularmos a correlação $\langle \hat{h}(k, t)\hat{h}(k', t) \rangle$ para em seguida continuarmos a resolução de $w^2(L, t)$. Antes será necessário uma recapitulação dos conceitos de convolução do produto de Fourier.

5.3.1 Recapitulação dos conceitos de convolução e transformada de Fourier

Definição: A convolução de duas funções integráveis, $f(t)$ e $g(t)$, é definida por:

$$f(t) * g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) g(t - \tau) d\tau. \quad (5.5)$$

A convolução segue as algumas propriedades da álgebra. Abaixo, listamos estas propriedades:¹

1. *Comutatividade:*

$$f(t) * g(t) = g(t) * f(t) \text{ ou } \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) g(t - \tau) d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} g(\tau) f(t - \tau) d\tau$$

2. *Associativa:*

$$f(t) * (g(t) * h(t)) = (f(t) * g(t)) * h(t)$$

3. *Distributiva com a adição:*

$$f(t) * (g(t) + h(t)) = f(t) * g(t) + f(t) * h(t)$$

4. *Identidade:*

$$f(t) = f(t) * \delta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) \delta(t - \tau) d\tau$$

Temos também um importante teorema da teoria da convolução e que muito utilizaremos neste trabalho.

Teorema da Transformada de Fourier da Convolução: Se $\mathcal{F}\{f(t)\} = \hat{F}(w)$ e $\mathcal{F}\{g(t)\} = \hat{G}(w)$, então:

$$\mathcal{F}\{f(t) * g(t)\} = \hat{F}(w)\hat{G}(w)$$

ou

$$\mathcal{F}^{-1}\{\hat{F}(w)\hat{G}(w)\} = f(t) * g(t),$$

onde \mathcal{F}^{-1} é a transformada de Fourier Inversa (TFI). O teorema é útil quando há o produto de duas funções no domínio da frequência, pois modifica a TFI de um produto em uma convolução no domínio real.

¹No apêndice deste trabalho, detalhamos o conceito de convolução e demonstramos suas propriedades e teoremas citados.

5.3.2 Função de correlação da altura

Para realizar o cálculo de $\langle \hat{h}(k, t) \hat{h}(k', t) \rangle$, trabalharemos com a eq. 3.20² reescrita no seguinte formato:

$$\hat{h}(k, w) = \frac{1}{\nu k^2 - iw} \hat{\eta}(k, w) = \hat{F}(k, w) \hat{G}(k, w), \quad (5.6)$$

onde $\hat{F}(k, w) = \frac{1}{\nu k^2 - iw}$, e $\hat{G}(k, w) = \hat{\eta}(k, w)$. A partir desta equação, aplicaremos a transformada de Fourier inversa (TFI) para obtermos o valor de $\hat{h}(k, t)$ e utilizaremos a relação da convolução apresentada anteriormente, pois ela é uma poderosa ferramenta para o cálculo da TFI. Assim:

$$\begin{aligned} \hat{h}(k, t) &= \mathcal{F}^{-1} \left\{ \hat{h}(k, w) \right\} = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \hat{F}(k, w) \hat{G}(k, w) \right\} \\ &= \mathcal{F}^{-1} \left\{ \hat{F}(k, w) \right\} * \mathcal{F}^{-1} \left\{ \hat{G}(k, w) \right\} = \hat{f}(k, t) * \hat{g}(k, t). \end{aligned} \quad (5.7)$$

Sabendo-se que a TFI de uma função com a forma $\hat{J}(w) = \frac{1}{a + iw}$, com $a > 0$, é $j(t) = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \hat{J}(w) \right\} = e^{-at} u(t)$, onde $u(t)$ é a *função de Heaviside* ou *função degrau unitário*. Então temos que $\hat{f}(k, t) = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \hat{F}(k, w) \right\} = e^{-\nu k^2 t} \cdot u(t)$. Para $\hat{g}(k, t)$ temos que $\hat{g}(k, t) = \hat{\eta}(k, t)$.

Assim a eq. 5.7 ficará:

$$\hat{h}(k, t) = \left(e^{-\nu k^2 t} u(t) \right) * \hat{\eta}(k, t).$$

Usando a definição da convolução, eq. 5.5,

$$\hat{h}(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\nu k^2 \tau} u(\tau) \hat{\eta}(k, t - \tau) d\tau. \quad (5.8)$$

Agora, substituímos $\hat{h}(k, t)$ na eq. 5.4, e realizando alguns cálculos, obtemos a seguinte expressão para a rugosidade:

$$w^2(L, t) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^t \int_0^t \underbrace{\langle \hat{\eta}(k, t - \tau') \hat{\eta}(k', t - \tau'') \rangle}_{e^{-v(k^2 \tau' + k'^2 \tau'')}} e^{i(k+k')x} d\tau' d\tau'' dk dk'. \quad (5.9)$$

²Note que a eq. 5.4, está escrita no espaço de frequência apenas em relação a variável x . Isto significa que, ao final, devemos aplicar a transformada inversa de Fourier em relação a t , para que as expressões estejam no espaço de dimensão do tempo.

A função de Heaviside $u(\tau)$, nos possibilitou, sem prejuízos, alterar o intervalo de integração das integrais de $d\tau'$ e $d\tau''$.³

Neste momento, para continuarmos a resolução de $w^2(L, t)$, necessitamos calcular a correlação do ruído $\langle \hat{\eta}(k, t - \tau') \hat{\eta}(k', t - \tau'') \rangle$.

5.3.3 Função de correlação do ruído

Para o cálculo da correlação, aplicamos a TFI em $\hat{\eta}(k, t)$, em relação a variável x ,

$$\hat{\eta}(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x, t) e^{-ikx} dx,$$

substituímos o valor de $\hat{\eta}(k, t)$ na correlação e obtemos uma expressão que depende do ruído no domínio real, conforme abaixo:

$$\langle \hat{\eta}(k, t - \tau') \hat{\eta}(k', t - \tau'') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\langle \eta(x, t - \tau') \eta(x', t - \tau'') \rangle}_{e^{-ikx} e^{-ik'x'}} dx dx'.$$

No capítulo 2 definimos duas propriedades para o ruído $\eta(x, t)$:

$$\langle \eta(x, t) \rangle = 0$$

e

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

Usando a segunda propriedade, e com as devidas mudanças de variáveis, temos

$$\langle \hat{\eta}(k, t - \tau') \hat{\eta}(k', t - \tau'') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} 2D \delta(x - x') \delta(\tau'' - \tau') e^{-ikx} e^{-ik'x'} dx dx'.$$

A quarta propriedade da convolução de Fourier (ver apêndice B.6), nos garante que $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') e^{-ik'x'} dx' = e^{-ik'x}$, assim

$$\langle \hat{\eta}(k, t - \tau') \hat{\eta}(k', t - \tau'') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} 2D \delta(\tau'' - \tau') e^{-i(k+k')x} dx.$$

³Para entradas nulas para $t < 0$, isto é, $g(t) = g(t) \cdot u(t)$, tem-se

$$h(t) = \begin{cases} \int_0^t f(\tau) g(t - \tau) d\tau, & t > 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases},$$

Cabe aqui, utilizarmos a seguinte propriedade da função delta:

$$\delta(k + k') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ix(k+k')} dx.$$

Assim, multiplicando e dividindo por 2π e utilizando a propriedade de delta descrita, conseguimos simplificar a expressão da correlação do ruído para

$$\langle \hat{\eta}(k, t - \tau') \hat{\eta}(k', t - \tau'') \rangle = 2\pi 2D \delta(\tau'' - \tau') \delta(k + k'). \quad (5.10)$$

Um resultado, onde mostra-se que mesmo no domínio da frequência, o ruído η permanece descorrelacionado.

5.4 Rugosidade

De posse da correlação do ruído, voltamos a eq. 5.9, substituindo a correlação encontrada,

$$w^2(L, t) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^t \int_0^t \underbrace{2\pi 2D \delta(\tau'' - \tau') \delta(k + k')} e^{-v(k^2\tau' + k'^2\tau'')} e^{i(k+k')x} d\tau' d\tau'' dk dk'.$$

Neste ponto $\delta(\tau'' - \tau')$ e $\delta(k + k')$ tem valor nulo para qualquer τ'' , τ' , k e k' , exceto para $\tau'' = \tau'$ e $k = -k'$, isto possibilita a eliminação de duas integrais, além das variáveis τ' e k' . Após estas simplificações, encontramos

$$w^2(L, t) = \frac{D}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^t e^{-2vk^2\tau} d\tau dk, \quad (5.11)$$

e calculando a integral $\int_0^t e^{-2vk^2\tau} d\tau$, temos

$$w^2(L, t) = \frac{D}{2\pi v} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - e^{-2vk^2t}}{k^2} dk.$$

Cabe aqui lembrar que a superfície de crescimento que estamos calculando a rugosidade $w(L, t)$ é um substrato de tamanho total L e com n sítios com a largura a , ou seja, $n = \frac{L}{a}$. Como o substrato não é infinito, pois possui tamanho L , e como os sítios não são infinitesimais, pois possuem

comprimento a , tem-se que a transformada de Fourier não será integrada para os infinitos comprimentos de onda, ou melhor, número de onda k variando de $-\infty$ a ∞ . E ao utilizarmos a TF, estamos trabalhando com uma integração de funções harmônicas com período $\frac{n\pi}{L}$. O número de sítios n pode variar de $n = 1$ até o valor de $n = \frac{L}{a}$, ou seja, n pertence ao intervalo $1 \leq n \leq \frac{L}{a}$. Isto nos conduz a ajustar o intervalo de integração entre $\frac{\pi}{L}$ até $\frac{\pi}{a}$. Assim, podemos reescrever a eq. 5.11 da seguinte forma:

$$w^2(L, t) = \frac{D}{2\pi v} \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{k^2} \left(1 - e^{-2vk^2t}\right) dk. \quad (5.12)$$

Restando-nos uma integral, onde a resolvemos pelo método de integração por partes. Assim, utilizando-se a definição de integração por partes dada por $\int_a^b U dV = UV|_a^b - \int_a^b V dU$, temos que a integral acima terá os seguintes valores para U, V, dU e dV :

$$U = \left(1 - e^{-2vk^2t}\right), \quad dV = \frac{1}{k^2}, \quad dU = 4vkte^{-2vk^2t} dk, \quad V = -\frac{1}{k}$$

Resolvendo a integral por partes, temos que

$$\begin{aligned} & \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{k^2} \left(1 - e^{-2vk^2t}\right) dk = \\ & = -\frac{1}{\pi}a + \frac{1}{\pi} \frac{a}{e^{2(v\frac{\pi^2}{a^2}t)}} + \frac{1}{\pi}L - \frac{1}{\pi} \frac{L}{e^{2(v\frac{\pi^2}{L^2}t)}} + \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{a}} 4vte^{-2vk^2t} dk \end{aligned}$$

Reescrevendo a eq. (5.12) com o valor recém encontrado para a integral, tem-se:

$$w^2(L, t) = -\frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} a + \frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} L + \frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} a e^{-2v\frac{\pi^2}{a^2}t} - \frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} L e^{-2v\frac{\pi^2}{L^2}t} + \frac{2Dt}{\pi} \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{a}} e^{-2vk^2t} dk. \quad (5.13)$$

Nossa expressão possui uma nova integral. A fim de encontrarmos fatores comuns a alguns termos da equação acima, realizamos a seguinte mudança de variável na integral da eq. 5.13,

$$y = 2vk^2t \Rightarrow k = \left(\frac{y}{2vt}\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$dk = (8vty)^{-\frac{1}{2}} dy,$$

e conseqüentemente, alteramos o intervalo de integração para

$$k = \frac{2\pi}{L} \Rightarrow y = \frac{8\pi^2vt}{L^2},$$

$$k = \frac{\pi}{a} \Rightarrow y = \frac{2v\pi^2t}{a^2} \approx \infty.$$

O intervalo superior da integral se aproxima do infinito, pois o termo a , que é o tamanho de cada sítio no substrato da superfície de crescimento tende a zero, portanto $y = \frac{2v\pi^2t}{a^2} \approx \infty$.

Reescrevendo a integral com a substituição proposta, temos:

$$\frac{2Dt}{\pi} \int_{\frac{8\pi^2vt}{L^2}}^{\infty} e^{-y} (8vty)^{-\frac{1}{2}} dy = \frac{Dt}{\frac{1}{(2vt)^{\frac{1}{2}} \pi \frac{8\pi^2vt}{L^2}}} \int_{\frac{8\pi^2vt}{L^2}}^{\infty} y^{-\frac{1}{2}} e^{-y} dy.$$

Colocamos em evidência o fator $\frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} L$, pois o mesmo se repete em outros termos da eq. 5.13,

$$\frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} L \left(\frac{2\pi^2vt}{L^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{\frac{8\pi^2vt}{L^2}}^{\infty} y^{-\frac{1}{2}} e^{-y} dy.$$

E assim, reescrevendo a eq. 5.13, teremos a seguinte expressão para $w^2(L, t)$:

$$w^2(L, t) = -\frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} a + \frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} L + \frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} a e^{-2v\frac{\pi^2}{a^2}t} - \frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} L e^{-2v\frac{\pi^2}{L^2}t} +$$

$$+ \frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} L \left(\frac{2\pi^2vt}{L^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{\frac{8\pi^2vt}{L^2}}^{\infty} y^{-\frac{1}{2}} e^{-y} dy. \quad (5.14)$$

A fim de reduzirmos esta equação, realizaremos as seguintes substituições:

O primeiro termo do lado direito será $A = -\frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} a$, o terceiro termo do lado direito da equação será $O(e^{-2\frac{\pi^2}{a^2}vt}) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{D}{v} a e^{-2\frac{\pi^2}{a^2}vt}$, pois a exponencial tende a zero quando $t \rightarrow \infty$ e a é muito pequeno.

Reescrevemos o 2º, 4º e 5º termos, colocando-se em evidência o fator comum $\frac{D}{v}L$, da seguinte forma,

$$\frac{D}{v}L \left[\frac{1}{2\pi^2} \left(1 - e^{-2\frac{\pi^2}{L^2}vt} + \left(\frac{2\pi^2 vt}{L^2} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{\frac{8\pi^2 vt}{L^2}}^{\infty} y^{-\frac{1}{2}} e^{-y} dy \right) \right] = \frac{D}{v}L f\left(\frac{vt}{L^2}\right).$$

De onde, na forma reduzida, temos a seguinte equação da rugosidade ao quadrado,

$$w^2(L, t) = A + \frac{D}{v}L f\left(\frac{vt}{L^2}\right) + O(e^{-2\frac{\pi^2}{a^2}vt}) \quad (5.15)$$

Neste resultado, o termo significativo é o segundo, reescrito para uma função de $f(x)$ com $x = \frac{vt}{L^2}$. Trataremos da veracidade desta significância mais abaixo. No momento, utilizaremos a relação de Family-Vicsek demonstrada no capítulo 2 para obtermos os expoentes α e z .

Para compararmos com o resultado encontrado, elevamos ao quadrado os termos da relação de Family-Vicsek, obtendo

$$w(L, t)^2 \sim L^{2\alpha} F\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (5.16)$$

E comparando a eq. 5.15 com a eq. 5.16, obtemos os seguintes expoentes de crescimento de EW.

$$z = 2 \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{1}{2}. \quad (5.17)$$

A veracidade deste resultado pode ser confirmada por uma análise da rugosidade (eq. 5.15) para valores limítrofes de t . Isto tendo em vista que a rugosidade possui dois comportamentos distintos, conforme detalhado na subseção 2.1.1 e na fig. 2.2 do capítulo 2, e relacionado abaixo:

$$w(L, t) \sim t^\beta \quad \text{para} \quad t \rightarrow 0 \quad (5.18)$$

e,

$$w(L, t) \sim L^\alpha \quad \text{para } t \rightarrow \infty \quad (5.19)$$

1º) Analisaremos a eq. 5.15 quando $t \rightarrow 0$:

Analisaremos a relação entre a rugosidade e outras variáveis como comprimento do substrato e tempo. Assim, o primeiro termo A será omitido da análise, pois possui valor constante, isto é explicado pela primeira relação acima, eq. 5.18, onde fica claro que termos constantes não influenciam na relação do tempo t com seu expoente β , e pelo mesmo motivo também omitimos o terceiro termo $O(e^{-2\frac{\pi^2}{a^2}vt})$, que tende a um valor constante. Resta-nos apenas o segundo termo, em que o analisamos no limite para $t \rightarrow 0$.

$$\lim_{t \rightarrow 0} w^2(t) = \frac{D}{v} L f\left(\frac{vt}{L^2}\right) = \frac{D}{v} L \left[\frac{1}{2\pi^2} \left(1 - e^{-2\frac{\pi^2}{L^2}vt} + \left(\frac{2\pi^2 vt}{L^2}\right) \frac{1}{2} \int_{\frac{8\pi^2 vt}{L^2}}^{\infty} y^{-\frac{1}{2}} e^{-y} dy \right) \right].$$

Para valores do tempo próximos de zero, a expressão $1 - e^{-2\frac{\pi^2}{L^2}vt}$ é nula, já a integral tem no limite o valor de $\sqrt{\pi}$. Assim, a expressão da rugosidade, para $t \rightarrow 0$, pode ser representada da seguinte forma:

$$w^2(L, t) \sim D(2v\pi)^{-\frac{1}{2}} t^{\frac{1}{2}}.$$

Tomando a constante $K^2 = D(2v\pi)^{-\frac{1}{2}}$ e extraindo a raiz quadrada da expressão temos,

$$w(L, t) \sim Kt^{\frac{1}{4}}.$$

Comparando esta relação com a relação $w(L, t) \sim t^\beta$ para $t \rightarrow 0$, temos que $\beta = \frac{1}{4}$. Que é exatamente o valor do expoente de crescimento β de Edwards-Wilkinson como já apresentado anteriormente.

Obteremos agora o expoente de rugosidade α da EEW.

2) Analisaremos a eq. 5.15 quando $t \rightarrow \infty$:

Como no caso anterior, a segunda relação, eq. 5.19, deixa clara, que termos constantes não influenciam na relação do tempo t com seu expoente α . Assim, o primeiro termo A é omitido por ser uma constante. O terceiro termo, $O(e^{-2\frac{\pi^2}{a^2}vt})$, se aproxima do valor unitário. Restando-nos o termo $\frac{D}{v} L f\left(\frac{vt}{L^2}\right)$ expresso abaixo:

$$\frac{D}{v}L f\left(\frac{vt}{L^2}\right) = \frac{D}{v}L \left[\frac{1}{2\pi^2} \left(1 - e^{-2\frac{\pi^2}{L^2}vt} + \left(\frac{2\pi^2 vt}{L^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\int_0^\infty y^{-\frac{1}{2}} e^{-y} dy}{8\pi^2 vt} \right) \right]$$

Para $t \rightarrow \infty$, temos que $e^{-2\frac{\pi^2}{L^2}vt}$ e $\frac{\int_0^\infty y^{-\frac{1}{2}} e^{-y} dy}{8\pi^2 vt}$ são nulos, restando a

função $f\left(\frac{vt}{L^2}\right)$, um valor constante, que chamaremos de P , e assim,

$$w^2(L, t) = A + \frac{D}{v}L P + 1 \quad \text{para } t \rightarrow \infty,$$

onde nota-se que para o tempo ($t \rightarrow \infty$), a equação tem todos os termos constantes, com exceção de L , permitindo-nos escrever a rugosidade $w(L, t)$ com a seguinte aproximação,

$$w(L, t) \sim L^{\frac{1}{2}} \quad \text{para } t \rightarrow \infty.$$

Comparando esta relação com a relação $w(L, t) \sim t^\alpha$ para $t \rightarrow \infty$ (eq. 5.19), temos que $\alpha = \frac{1}{2}$. Confirmando assim, o expoente de rugosidade α de EEW.

Assim, obtivemos a partir da própria resolução da equação de Edwards-Wilkinson os expoentes críticos α e β . O expoente dinâmico z é obtido utilizando a relação de Family-Vicsek, ou seja, $z = \alpha/\beta$ de modo que encontra-se $z = 2$.

Capítulo 6

Resolução analítica da Equação de Edwards-Wilkinson com memória - EEWM

Neste capítulo, objetivamos encontrar uma formulação para evolução da rugosidade em um crescimento regido pela EEWM. Em outras palavras, obteremos a generalização da rugosidade $w(L, t)$. Isto simplificará a busca por solução da equação para diferentes funções memórias $\nu(t)$.

Trabalhando apenas com transformadas de Fourier, que foi a estratégia utilizada no capítulo anterior, conseguimos encontrar uma formulação para a solução, mas que na prática se mostrou pouco eficaz (encontramos poucas funções memórias que se encaixavam na solução). Por isso, optamos por trabalhar com transformada de Laplace (TL), em conjunto com a transformada de Fourier (TF), conforme transcrito a seguir.

6.1 Transformada de Laplace

O primeiro passo é definirmos a notação que adotaremos para a transformada de Laplace nas funções da equação em estudo, no caso, a EEWM abaixo:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \int_0^t \nu(t - \tau) \frac{\partial h^2(x, \tau)}{\partial^2 x} d\tau + \eta(x, t). \quad (6.1)$$

Seja $f(t)$ uma função de t definida para $t > 0$. Então, a **transformada de Laplace** de $f(t)$ é denotada por

$$L\{f(t)\} = F(s) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (6.2)$$

onde s é uma variável complexa, e por isso dizemos que a função pertence ao domínio complexo. O operador L , é chamado *operador da transformada de Laplace*.

Se a transformada de Laplace de uma função $f(t)$ é $F(s)$, isto é, se $L[f(t)] = F(s)$, então $f(t)$ é chamada de **transformada inversa de Laplace** de $F(s)$ e, simbolicamente, podemos escrever $f(t) = L^{-1}[F(s)]$, onde L^{-1} é chamado *operador da transformada inversa de Laplace*.

Aqui usaremos a definição através dos operadores L e L^{-1} , que representam a TL e a TLI, respectivamente. Tomando o cuidado de fazermos os devidos ajustes de notação, substituindo corretamente a função f por $h(x, t)$, $\nu(t)$ ou $\eta(x, t)$ conforme for o caso.

Abaixo, mostraremos as propriedades que serão utilizadas na solução, ao leitor interessado, no apêndice transcrevemos com mais detalhes esta transformadas e suas propriedades.

Propriedade da transformada de Laplace de derivadas: Se $L[f(t)] = F(s)$, com $f'(t)$ contínua por partes, então

$$L[f'(t)] = sF(s) - f(0). \quad (6.3)$$

Teorema do Produto da Convolução de Laplace: Se $L[f(t)] = F(s)$ e $L[g(t)] = G(s)$, então:

$$L[(f * g)(t)] = F(s) \cdot G(s) \quad (6.4)$$

ou, simplesmente,

$$L^{-1}[F(s) \cdot G(s)] = (f * g)(t). \quad (6.5)$$

onde $(*)$ representa o operador da convolução.¹

¹O conceito da convolução e suas implicações nas transformadas estão descritas no apêndice deste trabalho.

6.2 Resolução da EEWM

Voltando a solução da EEWM, seguindo as definições apresentadas, primeiro realizamos a TL em t , conforme abaixo,

$$s\widehat{h}(x, s) - \widehat{h}(x, 0) = \nu(s) \frac{\partial h^2(x, s)}{\partial^2 x} + \widehat{\eta}(x, s),$$

no lado esquerdo, usamos a propriedade da transformada de Laplace de derivadas (eq. 6.3), já o primeiro termo do lado direito é resultado do *Teorema do Produto da Convolução de Laplace* (eq. 6.4), onde $F(s) = \nu(s)$ e $G(s) = \frac{\partial h^2(x, s)}{\partial^2 x}$. E por definição, temos que $\widehat{h}(x, 0) = 0$, assim

$$s\widehat{h}(x, s) = \nu(s) \frac{\partial h^2(x, s)}{\partial^2 x} + \widehat{\eta}(x, s).$$

Agora, realizamos a TF em relação a x , já definida na seção 3.2.1, do cap. 3:

$$s\widehat{h}(k, s) = \nu(s) (-k^2) \widehat{h}(k, s) + \widehat{\eta}(k, s).$$

Reescrevendo a equação em função de $\widehat{h}(x, s)$, temos

$$\widehat{h}(k, s) = \frac{1}{k^2\nu(s) + s} \widehat{\eta}(k, s), \quad (6.6)$$

que é a EEWM nos domínios complexo (s) e da frequência (k).

Como esta etapa dos cálculos é semelhante ao realizado no cap. 5, reescrevemos a eq. 5.4 que será o caminho pelo qual encontraremos o valor de $w(L, t)$.

$$w^2(L, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \widehat{h}(k, t) \widehat{h}(k', t) \rangle e^{i(k+k')x} dk dk'. \quad (6.7)$$

6.2.1 Função de correlação da altura

Para obtermos a rugosidade, necessitamos encontrar a correlação $\langle \widehat{h}(k, t) \widehat{h}(k', t) \rangle$, para isso devemos calcular a transformada de Laplace Inversa (TLI) da eq. 6.6, da seguinte maneira:

$$L^{-1} \left\{ \widehat{h}(k, s) \right\} = L^{-1} \left\{ \frac{1}{k^2\nu(s) + s} \widehat{\eta}(k, s) \right\},$$

em que $L^{-1} \left\{ \widehat{h}(k, s) \right\} = \widehat{h}(k, t)$. Novamente utilizamos o *teorema do produto da convolução de Laplace*, (eq. 6.5), de onde temos,

$$\widehat{h}(k, t) = R(k, t) * g(k, t),$$

sendo $R(k, t) = L^{-1} \left\{ \frac{1}{k^2 \nu(s) + s} \right\}$ e $g(k, t) = L^{-1} \{G(k, s)\} = \widehat{\eta}(k, t)$. Resultando na seguinte relação para $\widehat{h}(k, t)$,

$$\widehat{h}(k, t) = \int_0^t R(k, \tau) \widehat{\eta}(k, t - \tau) d\tau.$$

Agora que obtemos a função $\widehat{h}(k, t)$, temos a seguinte expressão para a correlação de $\widehat{h}(k, t)$:

$$\left\langle \widehat{h}(k, t) \widehat{h}(k', t) \right\rangle = \left\langle \int_0^t R(k, \tau) \widehat{\eta}(k, t - \tau) d\tau \cdot \int_0^t R(k', \tau) \widehat{\eta}(k', t - \tau) d\tau \right\rangle$$

rearranjando as integrais e os termos da equação temos,

$$\left\langle \widehat{h}(k, t) \widehat{h}(k', t) \right\rangle = \int_0^t \int_0^t \langle \widehat{\eta}(k, t - \tau) \widehat{\eta}(k', t - \tau') \rangle f(k', \tau') R(k, \tau) d\tau d\tau'$$

Necessitamos da correlação $\langle \widehat{\eta}(k, t - \tau) \widehat{\eta}(k', t - \tau') \rangle$ que foi obtida na seção 4.3.3 (eq. 5.10), substituindo na equação acima temos

$$\left\langle \widehat{h}(k, t) \widehat{h}(k', t) \right\rangle = 4D\pi \int_0^t \int_0^t \delta(\tau - \tau') \delta(k + k') f(k', \tau') R(k, \tau) d\tau d\tau',$$

que é a correlação que precisávamos para terminar o cálculo da rugosidade $w(L, t)$.

6.2.2 Rugosidade

De posse da correlação da altura $\widehat{h}(k, t)$, voltamos a eq. 6.7, substituindo a correlação encontrada,

$$w^2(L, t) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^t \int_0^t \underbrace{4D\pi \delta(\tau - \tau') \delta(k + k')} R(k', \tau') R(k, \tau) d\tau d\tau' e^{i(k+k')x} dk dk'$$

Neste ponto $\delta(\tau - \tau')$ e $\delta(k + k')$ são nulos para quaisquer τ, τ', k e k' , exceto para $\tau = \tau'$ e $k = -k'$, isto possibilita a eliminação de duas integrais, além das variáveis τ' e k' . Após estas simplificações, encontramos

$$w^2(L, t) = \frac{D}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^t R^2(k, \tau) d\tau dk.$$

Com os mesmos argumentos utilizados no capítulo anterior, ajustamos o intervalo de integração, e obtemos a seguinte expressão para a solução da rugosidade,

$$w^2(L, t) = \frac{D}{\pi} \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{a}} \int_0^t R^2(k, \tau) d\tau dk, \quad (6.8)$$

onde chamamos $\tilde{R}(k, \tau)$ de função resposta de $w(L, t)$, tal que $R(k, \tau) = L^{-1} \left\{ \frac{1}{k^2 \nu(s) + s} \right\}$.

A eq. 6.8 é solução geral da equação de Edwards-Wilkinson com memória. Esta expressão diminui consideravelmente os esforços para a obtenção da solução da EEWM e depende exclusivamente da função memória $\nu(t)$ agregada a equação. O problema agora passa a ser a obtenção do valor da função resposta $R(k, \tau)$, e para isto, deveremos calcular a TL de $\nu(t)$ e posteriormente a TLI da expressão $\frac{1}{k^2 \nu(s) + s}$, o que em alguns casos pode ser complexo, pelas dificuldades inerentes das transformadas de Laplace e suas inversas para algumas funções.

6.3 Discussões e casos particulares

Aqui podemos fazer um paralelo com os resultados obtidos nas funções memórias reescaláveis e enriquecer a discussão com novas funções memórias ainda não analisadas.

► $\nu(t) = \nu \cdot \delta(t)$

A primeira função que discutiremos é a função $\nu(t) = \nu \cdot \delta(t)$, vimos por reescalas, que esta função particulariza a solução da EEW com memória, para o caso de EEW sem memória.

A solução desta rugosidade, pode ser calculada pela eq. 6.8, da seguinte maneira.

Primeiro obtemos a TL de $\nu(t)$,

$$\nu(s) = L\{\nu(t)\} = L\{\nu \cdot \delta(t)\} = \nu,$$

em seguida calculamos a função resposta $R(k, \tau) = L^{-1} \left\{ \frac{1}{k^2 \nu(s) + s} \right\}$. Onde obtemos que $R(k, \tau) = e^{-k^2 \nu \tau}$.

Por conseguinte, substituindo a função resposta, na eq. 6.8, teremos a seguinte solução para a EEWM com memória $\nu(t) = \nu \cdot \delta(t)$.

$$w^2(L, t) = \frac{D}{\pi} \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{a}} \int_0^t e^{-2k^2 \nu \tau} d\tau dk.$$

Que é exatamente a expressão encontrada no capítulo anterior, ao calcularmos a solução da EEW, eq. 5.11. Portanto, a solução da equação de Edwards-Wilkinson pode ser calculada pela função memória $\nu(t) = \nu \cdot \delta(t)$ inserida na EEWM. Aqui percebemos uma nova maneira de solucionarmos a EEW. Com esta memória, que se reduz ao caso sem memória, a eq. 6.8 torna a solução muito mais simples e evidente do que o apresentado por Nattermann *et.al.*.

► $\nu(t) = 1$

Na seção 5.1.2., prometemos reanalisar a função memória unitária, pois os expoentes $\alpha = 0$ e $z = 1$ encontrados não foram suficientes para explicar em termos físicos o comportamento da rugosidade do crescimento. Por isso vamos a sua solução analítica.

A TL de $\nu(t)$ é

$$\nu(s) = L\{\nu(t)\} = L\{1\} = \frac{1}{s}.$$

Já a função resposta $R(k, \tau) = L^{-1} \left\{ \frac{1}{k^2 \frac{1}{s} + s} \right\} = \cos(k\tau)$, e consequentemente a seguinte expressão para $w^2(L, t)$:

$$w^2(L, t) = \frac{D}{\pi} \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{a}} \int_0^t \cos^2(k\tau) d\tau dk.$$

Calculando as integrais, temos,

$$w^2(L, t) = \frac{1}{4} \frac{D}{\pi} \frac{LaSi\left(\frac{2\pi}{a}t\right) + 2\pi Lt - LaSi\left(\frac{2\pi}{L}t\right) - 2\pi at}{aL},$$

em que a função $Si(t)$ é a representação para a integral $\int_0^t \frac{\sin x}{x} dx$, a qual converge para $\frac{\pi}{2}$ para t suficientemente elevado, ou seja,

$$w^2(L, t) \approx \frac{Dt}{2} \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{L} \right). \quad (6.9)$$

Relação relativamente simples onde para a constante e $L \rightarrow \infty$, temos que $w(L, t) \approx t^{\frac{1}{2}}$.

Comparando-se esta relação com a expressão (2.3), observamos que o valor do expoente de crescimento β é igual a $\frac{1}{2}$. Como vimos no capítulo 2, a EEW é a representação contínua para o modelo de Deposição Aleatória com Relaxação Superficial. Já a EEWM com memória igual a $\nu(t) = 1$, com solução apresentada na eq. 6.9, tem como modelo discreto a Deposição Aleatória - DA ². Ou seja, para esta memória, a EEWM deixa de ser uma equação do modelo de Deposição aleatória com relaxação superficial - DARS e passa a ser equação do modelo de Deposição Aleatória - DA. A rugosidade no modelo DA não possui correlação entre os sítios vizinhos, e com isso a rugosidade cresce constantemente, sem ocorrer a saturação.

► $\nu(t) = e^{-t}$

A função exponencial possui características, que em tese, mostra-se ideal para a atuação como memória de um processo de crescimento. Esta função obedece o pré-requisito de tender a zero quando o tempo t tende ao infinito (eq. 4.2). Transcrevemos abaixo, a EEWM com esta memória:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \int_0^t e^{t-\tau} \frac{\partial h^2(x, \tau)}{\partial^2 x} d\tau + \eta(x, t). \quad (6.10)$$

Esta é exatamente a EEW, com a função memória, $\nu(t) = e^{-t}$. Realizando o cálculo algébrico, encontramos a seguinte função resposta $R(k, \tau)$:

$$R(k, \tau) = e^{-\frac{1}{2}\tau} \left(\cosh \left(\frac{1}{2} \sqrt{1 - 4k^2\tau} \right) + \frac{\sinh \left(\frac{1}{2} \sqrt{1 - 4k^2\tau} \right)}{\sqrt{1 - 4k^2}} \right)$$

E portanto, utilizando a equação da solução da rugosidade, eq. 6.8, temos a seguinte solução para a rugosidade ao quadrado:

²Este fato pode ser observado em [15], onde é detalhado vários modelos discretos de crescimento, entre eles o DA, DARS e também relaciona as respectivas equações contínuas a cada modelo de crescimento apresentado.

$$w^2(L, t) = \frac{D}{\pi} \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{a}} \int_0^t \left(e^{-\frac{1}{2}\tau} \left(\cosh \left(\frac{1}{2} \sqrt[2]{1 - 4k^2\tau} \right) + \frac{\sinh \left(\frac{1}{2} \sqrt[2]{1 - 4k^2\tau} \right)}{\sqrt[2]{1 - 4k^2}} \right) \right)^2 d\tau dk.$$

Uma expressão de difícil obtenção dos expoentes de crescimento α e z , e por este motivo, recorreremos ao auxílio do software matemático Maple, e da ferramenta gráfica Gnuplot, e assim, numericamente encontramos os expoentes de crescimento desta EEWM. Abaixo descrevemos as etapas para o cálculo:

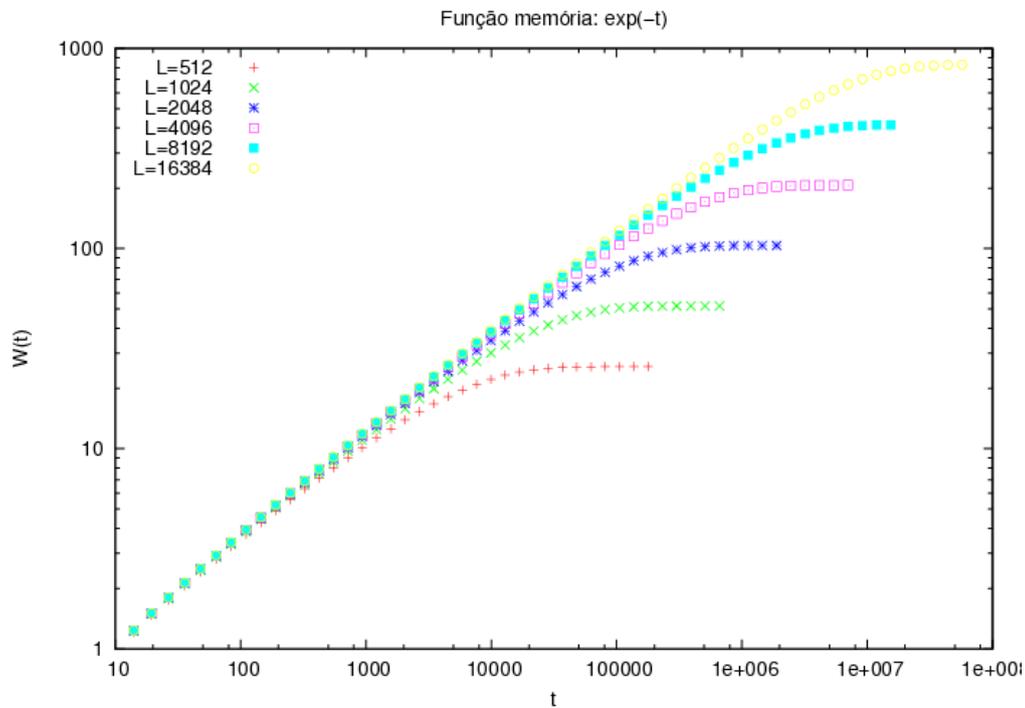


Figura 6.1: Gráfico com a evolução no tempo da rugosidade $w(L, t)$ de um substrato de tamanhos $L=512, 1024, 2048, 4096, 8192$ e 16384 .

1° Passo - Escrevemos um script (em Maple) para a obtenção da solução numérica da equação. Por este script, encontramos a função resposta $R(k, \tau)$. (Encontra-se no apêndice deste trabalho o script utilizado para o cálculo da rugosidade.)

2° Passo - Após encontrarmos a $R(k, \tau)$, calculamos numericamente o valor da rugosidade $w(L, t)$. Gerando uma tabela de dados com informações

da evolução temporal da rugosidade $w(L, t)$, para diferentes L 's, neste caso, utilizamos os seguintes valores de $L = 512, 1024, 2048, 4096, 8192$ e 16384 .

3° Passo - Geramos o gráfico da curva para cada L (fig. 6.1):

Em seguida, escolhemos a curva de maior substrato, no caso, $L = 16384$ e realizamos o ajuste de curva para valores do tempo anteriores a saturação (fig. 6.2), encontrando o valor do expoente β . E, fazemos ajustes de curva para tempos posteriores a saturação, e calculamos a rugosidade de saturação (w_{sat}) para cada curva (Todos os L 's), conforme descrito a seguir:

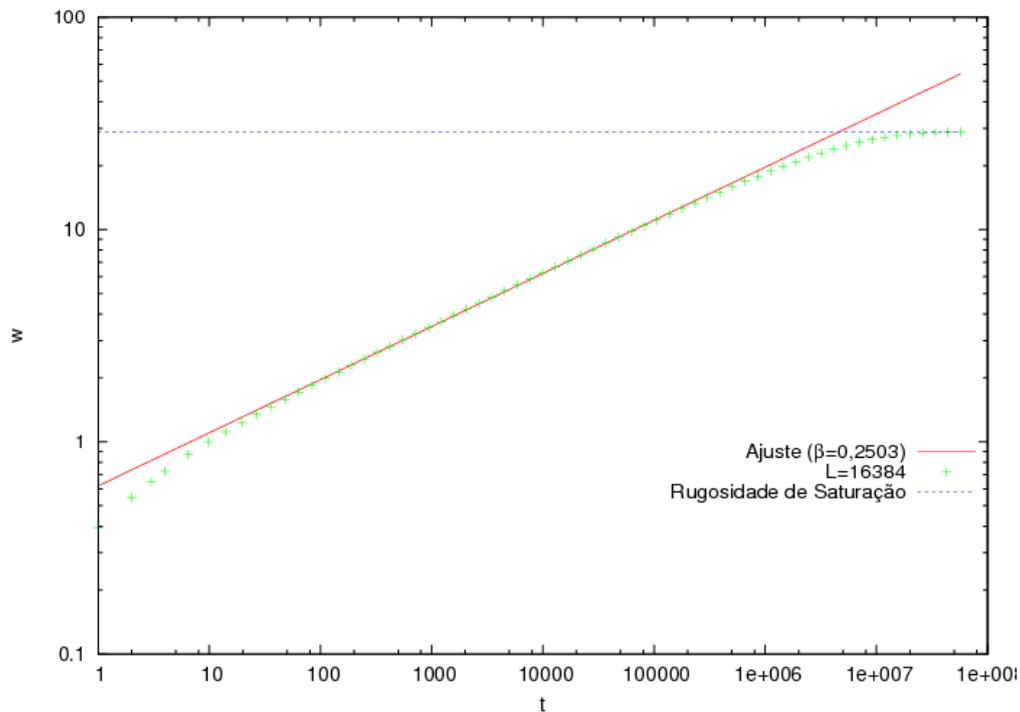


Figura 6.2: Gráfico com a evolução no tempo da rugosidade $w(L, t)$ de um substrato de tamanho $L=16384$, juntamente com a curva de ajuste que fornece o valor do expoente β .

Para o cálculo do expoente de crescimento β , realizamos o ajuste de curva para os valores de w_{sat} anteriores a saturação da rugosidade. Este ajuste é feito obedecendo a seguinte relação de $w(L, t)$.

$$w(L, t) \approx L^\beta$$

Como os valores de w estão em base logarítmica, a relação pode ser reescrita como,

$$\log w(L, t) \approx \beta \log L$$

ou seja, o β é a inclinação da reta obtida pelo ajuste de curva realizados para valores do tempo t anteriores a saturação de w , como mostrado no gráfico da fig. (6.2), gerado para $L = 16384$.

4º Passo - Para o cálculo do expoente de saturação α , realizamos o ajuste de curva para os valores de w_{sat} encontrados para cada L . Este ajuste de curva é feito sobre a ótica da seguinte relação de w_{sat} .

$$w_{sat} \approx L^\alpha$$

Como os valores de w_{sat} , estão em forma logarítmica, a relação passa a ser:

$$\log w_{sat} \approx \alpha \log L$$

ou seja, α é obtido pela inclinação da reta do gráfico mostrado na figura (6.3).

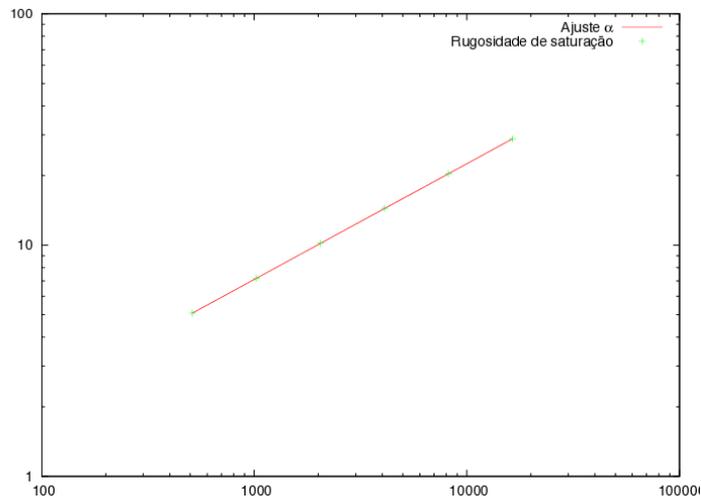


Figura 6.3: Gráfico que representa ajuste de curva realizado com os $w_{sat/s}$, para obtenção do expoente de saturação α .

E assim, seguindo cada um dos passos descritos acima obtemos os seguintes valores para os expoentes α e β :

$$\alpha = 0.5004 \pm 0.0003 \quad \text{e} \quad \beta = 0.2503 \pm 0.0008$$

Este resultado mostra que esta função memória não alterou os expoentes de crescimento α , β e z , mantendo a mesma classe de universalidade de EW, ou seja, não houve mudança na correlação existentes entre os primeiros sítios vizinhos.

Esta função memória permiti-nos acrescentar parâmetros b e c , de tal forma a reescrevermos a memória como, $\nu(t) = a \cdot e^{-bt}$. Ajustes feitos nestes parâmetros a e b , não nos permitiu resultados conclusivos, de modo que temos um caminho para ser explorado nas próximas pesquisas e considerações.

Abaixo, temos uma tabela com as três funções memórias utilizadas neste método, e seus respectivos expoentes e funções respostas $R(\tau)$ encontrados.

Função memória	expoentes	$R(\tau)$
$v(t) = v \cdot \delta(t)$	$z = 2; \alpha = \frac{1}{2}$	$e^{-k^2 v \tau}$
$v(t) = 1$	$\beta = \frac{1}{2}$	$\cos(k\tau)$
$v(t) = e^{-t}$	$z = 2; \alpha = \frac{1}{2}$	$e^{-\frac{1}{2}\tau} \left(\cosh \left(\frac{1}{2} \sqrt[2]{1 - 4k^2} \tau \right) + \frac{\sinh \left(\frac{1}{2} \sqrt[2]{1 - 4k^2} \tau \right)}{\sqrt[2]{1 - 4k^2}} \right)$

Tabela 6.1: Funções memórias utilizadas no método analítico.

Em memórias mais complexas, a determinação dos expoentes do crescimento pode ser insociável analiticamente. Mas felizmente, como verificamos neste capítulo, em alguns casos é possível solucionar a equação com memória, permitindo a determinação dos valores exatos dos expoentes.

Capítulo 7

Conclusão

Nesta dissertação, estudamos a equação de Edwards-Wilkinson (EEW) que é uma das mais simples equações lineares de crescimento, e cujos expoentes críticos definem a classe de universalidade de Edwards-Wilkinson. Vimos que uma classe de universalidade é uma classificação dada a um grupo de crescimentos distintos, porém com mesmos valores de coeficientes de crescimento α , β e z . Com o propósito de encontrarmos tais expoentes para EEW, utilizamos o método das reescalas, de duas maneiras: da maneira tradicional, onde reescalamos a equação na sua origem e em seguida, reescalando a equação no domínio das frequências.

No capítulo 5, realizamos um estudo da solução analítica da EEW desenvolvida por nós, de modo que conseguimos simplificar a solução encontrada no conhecido trabalho de Nattermann [2]. Isto foi possível, ao realizarmos a transformada inversa de Fourier apenas sobre a variável do tempo, tornando a solução mais simples.

Nos capítulos 4 e 6, generalizamos a equação de Edwards-Wilkinson inserindo uma função memória no termo de tensão superficial. A intenção foi estudarmos a atuação de uma memória nestes tipos de crescimento e como uma memória pode alterar a classe de universalidade de um crescimento. De posse desta nova equação, rebatizada como Equação de Edwards-Wilkinson com memória (EEWM), reaplicamos a metodologia de solução utilizada nos capítulos 3 e 5, para a equação com memória.

Dentre as funções memórias $\nu(t)$, começamos a estudar aquelas com características reescaláveis. Conseguimos um grupo de funções que atendiam aos nossos pré-requisitos. Destas funções, mostramos não existir nenhuma função memória reescalável cujo crescimento pertença a classe de universalidade de *KPZ*.

Em seguida, desenvolvemos uma equação exata da EEWM para obtenção da rugosidade $w(L, t)$. De posse dessa solução, estudamos diversas memó-

rias. Dentre elas, estudamos a memória do tipo função delta, $\nu(t) = \delta(t)$, onde mostramos que a EEWM com esta memória recai ao caso sem memória. Estudamos a função memória unitária, $\nu(t) = 1$, e verificamos que a equação torna-se uma representação do crescimento de deposição aleatória. E por último, analisamos a memória $\nu(t) = e^{-t}$, nesta memória calculamos numericamente os valores dos expoentes α e β , e mostramos que a equação permanece na classe de universalidade de EW.

O resultado mais promissor foi encontrado ao trabalharmos com memórias reescaláveis. Na função memória $\nu(t) = \frac{1}{t^n}$, conseguimos parametrizar os expoentes α e z em função do expoente n , este resultado provou-nos a possibilidade de migrarmos para novas classes de universalidade, e consequentemente permite-nos propor modelos contínuos mais simples para diversas classes de universalidades. Uma perspectiva futura para este trabalho é a obtenção de soluções analíticas de equações com funções memórias que possuam parâmetros ajustáveis, de modo que ao alterar esses parâmetros, altere os coeficientes de crescimento.

Referências Bibliográficas

- [1] Edwards, Samuel F., and D. R. Wilkinson. “The surface statistics of a granular aggregate.” Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences 381.1780 (1982): 17-31.
- [2] Nattermann, Thomas, and Lei-Han Tang. “Kinetic surface roughening. I. The Kardar-Parisi-Zhang equation in the weak-coupling regime.” Physical Review A 45.10 (1992): 7156.
- [3] B. A. Mello, A. S. Chaves, F. A. Oliveira, Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid, *Phys. Rev. E*, **63**, 041113 (2001).
- [4] F. D. A. A. Reis, Dynamic transition in etching with poisoning, *Phys. Rev. E*, **68**, 041602 (2003).
- [5] J. Merikoski, J. Maunuksela, M. Myllys, J. Timonen, M. J. Alava, Temporal and spatial persistence of combustion fronts in paper, *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 24501 (2003).
- [6] A. Myllys, J. Maunuksela, A. Alava, J. Merikoski, J. Timonen, Kinetic roughening in slow combustion of paper, *Phys. Rev. E*, **64**, 036101 (2001).
- [7] Z. Csahók, T. Vicsek, Kinetic roughening in a model of segmentation of granular materials, *Phys. Rev. A*, **46**, 4577 (1992).
- [8] E. Ben-Jacob, O. Shochet, A Tenenbaum, I. Cohen, A. Czirók, T. Vicsek, Communication, regulation and control during complex patterning of bacterial colonies, *Fractals*, **2**, 15 (1994).
- [9] M. Matsushita, H. Fujikawa, Diffusion-limited growth in bacterial colony formation, *Physica*, **44**, 12294 (1991).
- [10] P. Jensen, A.-L Barabasi, H. Larralde, S. Havlin, H. E. Stanley, Model incorporating deposition, diffusion, and aggregation in submonolayer nanostructures, *Phys. Rev. E*, **50**, 618 (1994).

- [11] Nascimento, F. S. “Caracterização de filmes finos de CdTe por meio de teoria de escala anômala.” (2010).
- [12] Mandelbrot, B. B., *The Fractal Geometry of Nature*. W. H. Freeman and Company, New York, 1983.
- [13] Zhang, Jun, et al. “Modeling forest fire by a paper-burning experiment, a realization of the interface growth mechanism.” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 189.3 (1992): 383-389.
- [14] Baroni, Mariana Pelissari Monteiro Aguiar “Análise matemático-computacional de superfícies irregulares: Aoplicações para materiais ativos nanoestruturados.” (2005).
- [15] Barabási, A-L. *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge university press, 1995.
- [16] Pal, S., and D. P. Landau. “The EdwardsWilkinson model revisited: large-scale simulations of dynamic scaling in 2+1 dimensions.” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 267.3 (1999): 406-413.
- [17] Costa, Ismael Victor de Lucena. “Processos estocásticos: difusão e crescimento.” (2006).
- [18] Family, Fereydoon, and Tamas 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* 18.2 (1985): L75.
- [19] Lesne, Annick, and Michel Laguères, eds. *Scale Invariance: From Phase Transitions to Turbulence*. Springer, 2012.
- [20] Kindermann., Clayton “Simulação numérica da competição entre modelos de crescimento de superfícies.” (2003).
- [21] De Mattos, Thiago Gomes. “Autômatos celulares e crescimento de interfaces rugosas.” (2005).
- [22] Kardar, Mehran, Giorgio Parisi, and Yi-Cheng Zhang. “Dynamic scaling of growing interfaces.” *Physical Review Letters* 56.9 (1986): 889.
- [23] Lara, Lucas Stori de, and Taiza A. Carmo. “Application of the multiple scales method in physics.” *Revista Brasileira de Ensino de Física* 31.4 (2009): 4701-4706.

- [24] H. Mori, "Transport collective motion and brownian motion." *Prog. Theor. Phys.*, 33, 423 (1965).
- [25] H. Mori, "A continued-fraction representation of time-correlation functions." *Prog. Theor. Phys.*, 34,399 (1965).
- [26] Callister, William D., and David G. Rethwisch. *Materials science and engineering: an introduction*. Vol. 7. New York: Wiley, 2007.
- [27] De Faria, Tatiana Estorani. "Simulação Computacional do crescimetno Epitaxial de CdTe sobre Si(111)" (2008).
- [28] Ferreira, S. O.; Neves, B. R. A.; Magalhaes-Paniago, R.; Malachias, A.; Rappl, P. H. O.; Ueta, A. Y.; Abramof, E.; Andrade, M. S. J. "Cryst. Growth" 231, 121 (2001)
- [29] Ferreira Jr., S. C.; Ferreira, S. O. "A one-dimensional model for the growth of CdTe quantum dots on Si substrates." *Physics Letters A* 352 (2006) 216
- [30] Sarma, S. Das, and P. Tamborenea. "A new universality class for kinetic growth: One-dimensional molecular-beam epitaxy." *Physical review letters* 66.3 (1991): 325.
- [31] Butkov, Eugene. *Física matemática*. Livros Técnicos e Científicos, 1988.
- [32] Spiegel, Murray R. *Análise de Fourier*. McGraw-Hill, 1976.
- [33] Diprima, Richard C.; Boyce, William E. *Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno*. LTC Editora, 2002.
- [34] Tonidandel, D. A. V., and A. E. A. Araújo. "Conectando transformadas: Fourier e Laplace." *Congresso Brasileiro de Automática*, Campina Grande, PB. Vol. 1. (2012).
- [35] Spiegel, Murray R. *Transformadas de Laplace*. McGraw-Hill, 1979.

Apêndice A - Série de Fourier

Este apêndice tem o objetivo de introduzir os conceitos de série de Fourier, afim de elucidar conceitos necessários para o entendimento formal das transformadas de Fourier e de Laplace, objeto principal do estudo explanado no próximo apêndice. O leitor interessado em aprofundar o assunto, indicamos a leitura de [31], [32] e [33], utilizados como referências nestes apêndices.

As séries trigonométricas surgiram na necessidade de se obter uma solução para problemas de valores de contorno, descrevemos a série abaixo,

Definição: Seja $f(x)$ definida no intervalo $(-L, L)$ e supondo $f(x)$ periódica, temos

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{m=1}^{\infty} \left(a_m \cos \frac{m\pi x}{L} + b_m \sin \frac{m\pi x}{L} \right) \quad (\text{A.1})$$

Esta série quando converge é chamada de *série de Fourier*. O primeiro passo é determinar quais funções podem ser representadas por esta série.

Os termos $\cos \frac{m\pi x}{L}$ e $\sin \frac{m\pi x}{L}$ são funções periódicas, pois possuem a seguinte propriedade:

$$f(x + T) = f(x)$$

para qualquer valor de x , com período é $T > 0$.

Agora se temos duas funções f e g periódicas, com mesmo período T , o produto $f \cdot g$ ou qualquer combinação linear $F(x) = c_1 f(x) + c_2 g(x)$ também será periódica de período T . E uma soma infinita de termos de mesmo período T também será periódica de período T .

Os termos $\cos \frac{m\pi x}{L}$ e $\sin \frac{m\pi x}{L}$ são periódicos de período fundamental $T = \frac{2L}{m}$, basta lembrar que o período fundamental das funções $\sin x$ e $\cos x$ é 2π .

Ortogonalidade das funções seno e cosseno: As funções $\cos \frac{m\pi x}{L}$ e $\sin \frac{m\pi x}{L}$ são mutuamente ortogonais no intervalo $-L \leq x \leq L$. E por este motivo satisfazem estas condições:

$$\int_{-L}^L \cos \frac{m\pi x}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ L, & m = n. \end{cases}$$

$$\int_{-L}^L \sin \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi x}{L} dx = 0, \text{ quaisquer } m, n; \quad (\text{A.2})$$

$$\int_{-L}^L \sin \frac{m\pi x}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ L, & m = n. \end{cases}$$

Chamaremos a equação A.1 de $f(x)$, obtendo:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{m=1}^{\infty} \left(a_m \cos \frac{m\pi x}{L} + b_m \sin \frac{m\pi x}{L} \right) \quad (\text{A.3})$$

Realizando um pouco de álgebra e utilizando a propriedade da ortogonalidade chega-se aos coeficientes a_m e b_m :

$$a_m = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{m\pi x}{L} dx, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

$$b_m = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{m\pi x}{L} dx, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.4})$$

Consequências: Em [33], mostra-se que toda função periódica g , com período T , tem todas as integrais de g sobre um intervalo de comprimento T , de mesmo valor, conclui-se que o intervalo de integração $-L \leq x \leq L$ pode ser substituído por qualquer outro intervalo de comprimento $2L$.

Em [31], temos uma abordagem complexa da Série de Fourier, usando-se

$$\cos \frac{m\pi x}{L} = \frac{1}{2} \left(e^{i \left(\frac{m\pi x}{L} \right)} + e^{-i \left(\frac{m\pi x}{L} \right)} \right)$$

$$\sin \frac{m\pi x}{L} = \frac{1}{2i} \left(e^{i \left(\frac{m\pi x}{L} \right)} - e^{-i \left(\frac{m\pi x}{L} \right)} \right)$$

Com estas reescritas de seno e cosseno na série (A.3), podemos definir um novo coeficiente c_n

$$c_m = \begin{cases} \frac{1}{2}(a_m - ib_m) & (m > 0), \\ \frac{1}{2}(a_m + ib_m) & (m < 0), \\ \frac{1}{2}a_0 & m = 0. \end{cases}$$

Então a Série de Fourier pode ser escrita da seguinte forma complexa:

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} c_m e^{i\left(\frac{m\pi x}{L}\right)} \quad (-L \leq x \leq L), \quad (\text{A.5})$$

em que c_m é deduzida por a_m e b_m assim,

$$c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) e^{-i\left(\frac{m\pi x}{L}\right)} dx. \quad (\text{A.6})$$

Apêndice B - Transformadas de Fourier e Laplace

Nosso objetivo neste apêndice é conceituarmos as transformadas de Fourier e Laplace, ferramentas muito utilizadas neste trabalho e de extrema importância na ciência. A transformada de Fourier em conjunto com a transformada de Laplace - constituem provavelmente como uma das principais ferramentas matemáticas das ciências das engenharias, da física-matemática e da matemática aplicada.[34]

Transformada como o próprio nome sugere, é uma operação matemática que promove uma mudança na equação com a finalidade de torná-la mais simples, e principalmente permite encontrar a função transformada e consequentemente a sua solução. As transformadas podem ser representadas por uma maiúscula ou por um til ($\tilde{\quad}$), ou ainda por um circunflexo ($\hat{\quad}$) sobre a função transformada, neste trabalho adotamos o ($\hat{\quad}$) para identificar nossas transformadas. Assim, por exemplo, a transformada de Fourier da função $f(t)$ é denotada por $\hat{f}(w)$, ou por exemplo, a transformada de Laplace da função $f(t)$ é denotada por $\hat{f}(s)$.

Transformada de Fourier

A integral de Fourier é obtida pela substituição da eq. A.5 em A.6, escrita como,

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(\xi) e^{-i\omega_m \xi} d\xi \right] e^{i\omega_m t} \delta_m, \quad (\text{B.1})$$

onde $\omega_m = \frac{2m\pi}{T}$ e $\delta_m = \omega_{m+1} - \omega_m$. Esta é uma representação discreta, tomando-se o limite $T \rightarrow \infty$, a variável discreta ω_m , torna-se a variável contínua ω e pela propriedade da função delta, δ_m passa a ser a diferencial $d\omega$. Assim, podemos escrever a eq. B.1, da seguinte forma:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{-i\omega\xi} d\xi \right] d\omega \quad (\text{B.2})$$

que é conhecida como **fórmula integral de Fourier**.

A integral contida no interior dos colchetes, é uma função que escrevemos como $F(\omega)$. Portanto,

$$F\{f(t)\} = F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad (\text{B.3})$$

esta função é definida como a **transformada de Fourier** da função $f(t)$. A condição suficiente para a existência da transformada é que a função $f(t)$ seja absolutamente integrável em $(-\infty, +\infty)$.

Já a **transformada de Fourier inversa** da função transformada $F(\omega)$ é definida por como,

$$F^{-1}\{F(\omega)\} = f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega. \quad (\text{B.4})$$

As eqs. B.3 e B.4 são chamadas de par de transformadas de Fourier, onde t representa o tempo, ω é a frequência angular e $F(\omega)$ é chamado de espectro de frequência da função $f(t)$. Este par de transformadas têm diferentes formas a depender da área em que estar se trabalhando. Nesta dissertação trabalhamos com funções de duas variáveis, ou seja., além da variável t e sua transformada ω , trabalhamos também com a variável espacial x e com o número de onda $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, sendo λ o comprimento de onda.

Teorema da Convolução para transformadas de Fourier

Define-se a **convolução** de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ por

$$f * g = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) \cdot g(t - \tau) d\tau \quad (\text{B.5})$$

A convolução é conhecida por suas propriedades semelhantes a operação algébrica do produto. Assim como no produto, a convolução tem algumas propriedades listadas a seguir:

1. $f(t) * g(t) = g(t) * f(t)$ (Comutatividade)
 2. $f(t) * [g(t) * h(t)] = [f(t) * g(t)] * h(t)$ (Associativa)
 3. $f(t) * [g(t) + h(t)] = f(t) * g(t) + f(t) * h(t)$ (Distributiva)
 4. $f(t) = f(t) \cdot \delta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) \cdot \delta(t - \tau) d\tau$ (Identidade)
- (B.6)

O resultado mais importante da convolução é conhecido como *teorema da Convolução de Fourier*, nos garante que a transformada de Fourier de uma convolução de $f(x)$ e $g(x)$ é o produto das transformadas de Fourier destas funções. Da seguinte maneira, considerando $F\{f(t)\} = F(\omega)$ e $F\{g(t)\} = G(\omega)$, então,

$$F\{f(t) * g(t)\} = F(\omega) \cdot G\{\omega\} \quad (\text{B.7.1})$$

ou ainda,

$$F^{-1}\{F(\omega) \cdot G\{\omega\}\} = f(t) * g(t) \quad (\text{B.7.2})$$

As integrais e transformadas de Fourier são extremamente utilizadas para resolver problemas de áreas distintas da ciência, em nosso trabalho a utilizamos para encontrar a solução de equações diferenciais estocásticas. Apesar de serem extremamente úteis, na aplicação prática vivenciamos certas dificuldades, pois funções relativamente simples não possuem transformadas, ou seja, as transformadas de Fourier são definidas para uma classe muito restrita de funções.

Transformada de Laplace

Seja $F(t)$ uma função de t definida para $t > 0$. Então, a *transformada de Laplace* de $F(t)$, denotada por

$$L\{F(t)\} = f(s) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-st} F(t) dt \quad (\text{B.8})$$

onde s é complexo.

Dizemos que a transformada de Laplace existe se a integral B.8 converge para algum valor s . Abaixo identificamos as transformadas de Laplace de algumas funções elementares. Para detalhes do cálculo sugerimos a leitura de [35].

Tabela de transformadas de Laplace

	$\mathbf{F(t)}$	$\mathbf{L \{F(t)\} = f(s)}$
1.	1	$\frac{1}{s}, s > 0$
2.	t	$\frac{1}{s^2}, s > 0$
3.	$t^n, n = 0, 1, 2, \dots$	$\frac{n!}{s^{n+1}}, s > 0$
4.	e^{at}	$\frac{1}{s-a}, s > a$
5.	$\sin at$	$\frac{a}{s^2+a^2}, s > 0$
6.	$\cos at$	$\frac{s}{s^2+a^2}, s > 0$
7.	$\sinh at$	$\frac{a}{s^2-a^2}, s > a $
8.	$\cosh at$	$\frac{s}{s^2-a^2}, s > a $
9.	$a \cdot \delta(t)$	a

Existe uma condição suficiente para a existência da transformada de Laplace de uma função, esta condição é descrita pelo teorema descrito a seguir:

Teorema 1.1. Se $F(t)$ é seccionalmente contínua em todo o intervalos finito $0 \leq t \leq N$ e de ordem exponencial γ para $t > N$, então sua transformada de Laplace $f(s)$ existe para todo $s > \gamma$.

Note que as condições do teorema são suficientes mas não necessárias para a existência da transformada de Laplace, ou seja, se uma função não pertence ao grupo especificado ela pode, ou não, possuir transformada de Laplace.

Definição: Se a transformada de Laplace de uma função $f(t)$ é $F(s)$, isto é, se $L[f(t)] = F(s)$, então $f(t)$ é chamada de *transformada inversa de Laplace* de $F(s)$ e, simbolicamente, podemos escrever

$f(t) = L^{-1}[F(s)]$, onde L^{-1} é chamado *operador da transformada inversa de Laplace*.

Propriedades da transformada de Laplace

Listamos a seguir, as principais propriedades da transformada de Laplace e sua Inversa, nestas consideramos apenas para funções que obedecem ao critério de existência Teorema 1.1:

Propriedade 1: (Linearidade) Se $L[f(t)] = F(s)$ e $L[g(t)] = G(s)$, então, para quaisquer a e b constantes complexas,

$$L[af(t) + bg(t)] = aL[f(t)] + bL[g(t)] = aF(s) + bG(s)$$

ou

$$L^{-1}[aF(s) + bG(s)] = aL^{-1}[F(s)] + bL^{-1}[G(s)] = af(t) + bg(t).$$

Propriedade 2: (Translação ou deslocamento) Se $L[f(t)] = F(s)$, então

$$L[e^{at}f(t)] = F(s - a)$$

ou

$$L^{-1}[F(s - a)] = e^{at}f(t).$$

Propriedade 3: (Transformada de Laplace de derivadas) Se $L[f(t)] = F(s)$, com $f'(t)$ contínua por partes, então $L[f'(t)] = sF(s) - f(0)$.

Propriedade 4: (Derivada de ordem superior) Se $L[f(t)] = F(s)$ e $f'(t)$ é contínua por partes, então

$$L[f^{(n)}(t)] = s^n F(s) - s^{n-1}f(0) - s^{n-2}f'(0) - \dots - sf^{(n-2)}(0) - f^{(n-1)}(0).$$

Propriedade 5: (Transformada de Laplace de Integrais) Se $L[f(t)] = F(s)$, então

$$L\left[\int_0^t f(u)du\right] = \frac{F(s)}{s}.$$

Propriedade 6: (Mudança de escala) Se $L[f(t)] = F(s)$ então

$$L[f(at)] = \frac{1}{a}F\left(\frac{s}{a}\right).$$

Propriedade 7: (Multiplicação por t) Se $L[f(t)] = F(s)$, então, para todo n natural,

$$L[t^n f(t)] = (-1)^n \frac{d^n F}{ds^n}(s) = (-1)^n F^n(s).$$

Propriedade 8: (Funções periódicas) Se $f(t)$ é uma função periódica com período T , isto é, $f(t + T) = f(t)$, para todo $t \geq 0$, então

$$L[f(t)] = \frac{\int_0^T e^{-st} f(t) dt}{1 - e^{-sT}}.$$

Propriedade 9: (Divisão por t) Se $L[f(t)] = F(s)$ e existe o limite $f(t) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(t)}{t}$, então

$$L\left[\frac{f(t)}{t}\right] = \int_s^\infty F(u) du.$$

Propriedade 10: (Teorema do valor inicial) Se $L[f(t)] = F(s)$, então

$$\lim_{t \rightarrow 0} f(t) = \lim_{s \rightarrow \infty} sF(s).$$

Propriedade 11: (Teorema do valor final) Se $L[f(t)] = F(s)$, então

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = \lim_{s \rightarrow 0} sF(s).$$

E por último definiremos um importante teorema para resolução de funções em que conhecemos as suas transformadas de Laplace inversas.

Teorema do Produto da Convolução de Laplace: Se $L[f(t)] = F(s)$ e $L[g(t)] = G(s)$, então:

$$L[(f * g)(t)] = F(s) \cdot G(s) \tag{B.9.1}$$

ou, simplesmente,

$$L^{-1}[F(s) \cdot G(s)] = (f * g)(t). \tag{B.9.2}$$

Apêndice C

Neste apêndice descrevemos o script, escrito no software matemático Maple, utilizado para calcular a função resposta $R(k, \tau)$, e conseqüentemente a rugosidade $w(L, t)$ de funções memórias descritas no capítulo 6 da dissertação.

Objetivo: Encontrar a função resposta e a solução numérica da rugosidade $w(L, t)$.

Esquema: Primeiro determinamos a função memória $v(t)$, em seguida, definimos a função $F(s) = \frac{1}{s+k^2v(s)}$, onde $v(s)$ é a transformada de Laplace da função memória $v(t)$, e por último definimos a função resposta $R(\tau) = L^{-1} \left\{ \frac{1}{s+k^2v(s)} \right\}$, obtida pela Transformada de Laplace Inversa da função $F(s)$.

Código: Abaixo, temos todo o script e as linhas de código usados para gerar os dados da solução numérica de $w(L, t)$. Neste código, consideramos um crescimento de interface de tamanho L , e o tamanho dos sítios a :

```
with(inttrans):
f:=t->exp(-t);
F:=s->1/(s+(k^2)*(laplace(f(t),t,s)));
R:=tau->invlaplace(F(s),s,tau);
simplify((D/Pi)*int(Int((R(tau)^2),k=Pi/L..Pi/a),tau=0..t));
g:=t->(int(Int(R(tau)^2, k = Pi/L .. Pi/a), tau = 0 .. t))/Pi;
for L from 512 to 16384 do
  print(L, b, c);
for i while evalf(f(i)-f(i-1)) > 0.000000001 do
  if evalf(f(i)-f(i-1)) < .1 then
    i := 1.3*i
  end if;
print(i, evalf(f(i)));
end do;
L := 2*L-1
end do
```