

DINÂMICA DA INTERFACE EM MODELOS DE CRESCIMENTO
UNIDIMENSIONAIS

Glaucia Alves da Silva

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade de Brasília, UnB, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Dr. Fernando Albuquerque de Oliveira

Coorientador: Dr. Márcio Sampaio Gomes Filho

Silva, Glaucia Alves da

Dinâmica da Interface em Modelos de Crescimento Unidimensionais/Glaucia Alves da Silva. – Brasília: UnB/IF, 2021.

XVI, 54 p.: il.; 29,7cm.

Orientador: Fernando Albuquerque de Oliveira

Dissertação (mestrado) – UnB/Instituto de Física, 2021.

Referências Bibliográficas: p. 47 – 54.

1. Crescimento de Interfaces. 2. Expoentes de crescimento. 3. Modelos de crescimento unidimensionais.
I. Oliveira, Fernando Albuquerque de. II. Universidade de Brasília, Instituto de Física. III. Título.

*“Dedico este trabalho a minha
mãe muito amada”.*

Agradecimentos

Quero agradecer a todos que fizeram parte dessa jornada. Talvez não exista palavras suficientes e significativas que me permitam agradecer todos vocês com o devido merecimento.

Agradeço à minha família que apesar de todas as diferenças sempre estiveram presentes em minhas decisões. Em especial quero agradecer à minha falecida avó Maria Alves do Nascimento e minha mãe M^a da Conceição Alves da Silva, por todo o apoio dedicado à minha formação e por serem o alicerce do meu caráter. Agradeço também a todos os meus familiares.

Agradeço ao professor orientador Fernando Albuquerque de Oliveira e ao meu coorientador Márcio Sampaio Gomes Filho pelo trabalho confiado a mim, ao avanço na minha vida profissional que se deu através dos diversos conselhos e discussões a respeito da pesquisa científica em Física, pois o mesmo me permitiu ter um maior aprofundamento sobre os conceitos estudados.

Também agradeço aos professores da UnB do Instituto de Física por contribuírem de forma significativa na minha formação acadêmica. E aos meus amigos de curso pelo apoio e dedicação que recebi ao longo desse curso que sempre estiveram próximos.

Ao meu namorado André de Lira Silva, sua ajuda e seu apoio foram para mim de valor inestimável. Sou muito feliz por saber que você está sempre ao meu lado me dando força para continuar em qualquer situação. Apenas posso me expressar através da limitação de meras palavras, e com elas lhe prestar esta humilde, mas sincera, homenagem. Muito obrigado!

E finalmente a CAPES, por todo apoio prestado nesta jornada.

Resumo

Fenômenos de crescimento de superfícies é um tema que tem sido muito estudado tanto do ponto de vista experimental quanto teórico. O mesmo pode ser observado como, por exemplo, em crescimento de filmes finos, formação de dunas e em crescimento de membranas celulares. Neste trabalho, apresentamos conceitos básicos relacionados ao crescimento de superfícies em processos de deposição de partículas e, em seguida, apresentaremos os três modelos estudados de crescimento/deposição de partículas em superfícies rugosas em $(1 + 1)$ dimensões. Sendo eles: o modelo de Deposição Aleatória com Relaxação Superficial, o modelo de corrosão e o modelo de Single-Step. Foi proposto como metodologia estudar as propriedades e características desses modelos, com o objetivo de obter o expoente de rugosidade mais próximo do valor exato, valor exato esse que é encontrado de forma analítica por meio de equações de crescimento já estabelecidas. Assim usamos aqui diferentes métodos de análise como, por exemplo, a obtenção desse expoente por meio de uma função de correlação. Analisamos os valores obtidos e chegamos a conclusão que dispor de uma função de correlação é possível encontrar um valor do expoente de rugosidade mais próximo do valor exato.

Palavras Chaves: Crescimento de Interfaces, Expoentes de crescimento e Modelos de crescimento unidimensionais

Abstract

Surface growth phenomena is a topic that has been extensively studied both experimentally and theoretically. The same can be observed as, for example, in thin film growth, dune formation, and in cell membrane growth. In this work, we present basic concepts related to surface growth in particle deposition processes and then present the three studied models of particle growth/deposition on rough surfaces in $(1 + 1)$ dimensions. These are: the Random Deposition with Surface Relaxation model, the corrosion model, and the Single-Step model. It was proposed as a methodology to study the properties and characteristics of three different growth models, with the objective of obtaining the roughness exponent closest to the exact value, which is found analytically through established growth equations. So we use different methods of analysis here, such as obtaining this exponent by means of a correlation function. We analyzed the values obtained and came to the conclusion that by having a correlation function it is possible to find a value of the roughness exponent that is closer to the exact value.

Keywords: Interface Growth, Growth Exponents and One-Dimensional Growth Models

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xiii
Lista de Símbolos	xiv
Lista de Abreviaturas	xvi
1 Introdução	1
1.1 Crescimento de Interfaces	1
1.1.1 Altura e Rugosidade	1
1.1.2 Leis de Escala e Expoentes Dinâmicos	8
1.2 Equações de Crescimento	10
1.2.1 Equação de Edwards-Wilkinson	10
1.2.2 Equação de Kardar-Parisi-Zhang	12
1.2.3 Classe de Universalidade	14
1.3 Autômato Celular	15
1.4 Objetivos	15
1.4.1 Objetivos específicos	16
2 Métodos	17
2.1 Descrição dos Modelos	18
2.1.1 Modelo I: Deposição Aleatória com Relaxação Superficial-DARS	19
2.1.2 Modelo II: modelo de Corrosão-ET	22
2.1.3 Modelo III: modelo Single-step-SS	25

3	Resultados	28
3.1	Análise dos dados	28
3.2	Procedimentos para obter o expoente de rugosidade	34
3.2.1	Obtendo α via função de correlação	38
4	Conclusões e Perspectivas	41
A	Ajustes	43
A.1	Dados dos ajustes de curva	43
A.2	Expoente de Crescimento	45
	Referências Bibliográficas	47

Lista de Figuras

1.1	Exemplos de deposição: (a) (lado esquerdo) mostra a deposição de flocos de neve em uma janela de vidro. (b) (lado direito) temos a representação de um substrato discreto, com h em função de L , na direção espacial x , num dado tempo t . Além disso nota-se a indicação do referencial de altura média $\bar{h}(t)$ pela reta em vermelho. Figura adaptada da.	2
1.2	As figuras mostram um exemplo típico da morfologia de filmes finos. De Almeida et al., com permissão de Physical Review B.	4
1.3	Gráfico da evolução da rugosidade em uma superfície de dimensão $1 + 1$. Os pontos em vermelho representam uma média com relação ao número de simulações. As linhas em preto representam o regime de crescimento t^β , o tempo de saturação t_{sat} e a rugosidade de saturação W_{sat} encontrada no regime de saturação.	5
1.4	Esquema do modelo de Deposição Aleatória. Onde h é a altura do substrato e x é a direção espacial na qual se o tamanho do substrato L é fixo. As três partículas (quadrados azuis)(A, B e C) são liberadas de posições aleatórias acima da superfície, posteriormente, tais partículas são depositadas sobre o topo das colunas abaixo delas (quadrados cinzas)(A',B' e C').	6
1.5	Esquema do modelo de Deposição Balística.	7

2.1	Representação esquemática da configuração inicial dos modelos estudados, em (a) observa-se os modelos DARS e ET com $h_i(0) = 0$ onde o sítio amarelo representa o sítio (i), o sítio vermelho o sítio $i + 1$ e o sítio verde o sítio $i - 1$. Na figura (b) tem-se a representação do modelo SS com $h_i(0) = (1/2 + (-1)^i/2) = [1 + (-1)^i]/2$ onde o sítio (i) está representado no sítio em branco e os vizinhos $i + 1$ e $i - 1$ nos sítios vermelho e verde, respectivamente.	18
2.2	Evolução temporal da rugosidade em escala log-log, onde a curva vermelha é uma média sobre o número de simulações. Nota-se que após um certo tempo (t) a rugosidade do sistema para de crescer atingindo o valor W_{sat} , linha pontilhada em azul, ao saturar, esse gráfico exemplifica um processo de crescimento correspondente ao modelo DARS.	20
2.3	Regras para a Deposição Aleatória com Relaxação Superficial. Com h sendo a altura da superfície e x a direção em que o substrato de tamanho L se encontra fixado.	21
2.4	Mecanismo do modelo de etching, onde h é a altura dos sítios e x representa a direção em que o substrato de tamanho L está fixado. Figura extraída de.	24
2.5	Ilustração esquemática das regras do modelo SS.	26
3.1	Rugosidade $W(t)$ como em função do tempo t para os modelos ET, SS e DARS em escala log-log. Os pontos representam a média sobre o número de simulações e as linhas em azul o resultado do ajuste para as Eqs. (1.3) e (1.8). As linhas na vertical denotam o valor do tempo de saturação t_{sat}	29
3.2	(a) Rugosidade $W(t)$ como função do tempo t . Os pontos representam os resultados das simulações enquanto a linha (azul) o resultado do ajuste para a Equação (3.1). Em (b), apresentamos os mesmos dados, porém na escala log-log.	30

3.3	Em (a) os pontos representam os valores de t_{sat} para cada modelo, DARS, ET e SS, pontos obtidos pelo ajuste de curva da Eq. (3.1), já a linha sólida (azul) representa o ajuste Eq. (3.1) e com esse ajuste encontramos o valor do expoente dinâmico z para cada modelo. Em (b), apresentamos o mesmo expoente usando o mesmo ajuste de curva (3.1), porém com dados de t_{sat} fornecidos por LP. As linhas pontilhadas representam o valor teórico esperado.	33
3.4	Rugosidade de saturação W_{sat} versus o tamanho do sistema L , para cada modelo, DARS, ET e SS. Em ambas as figuras temos α calculado por meio da Eq. (1.4), linhas pontilhadas, sobre os valores de W_{sat} obtidos mediante EUR em (a) e LP em (b).	35
3.5	Rugosidade de saturação W_{sat} versus o tamanho do sistema L , para cada modelo. As linhas pontilhadas representam o ajuste da Eq. (3.4) com atribuição da constante C_2 , aplicados aos valores que foram encontrados por meio da EUR em (a) e LP em (b).	37
3.6	Valores de α como em função tempo t para o modelos SS, obtidos via função de correlação, Eq. (3.12). A linha contínua em vermelho refere-se a média obtida no intervalo de tempo $4 \times 10^4 < t < 9 \times 10^4$, isto é, $\bar{\alpha} = 0.49876(1)$	39
3.7	Valores de α como em função de diferentes tamanhos do substrato L para os modelos ET e SS. As linhas pontilhadas representam o ajuste de curva, Eq. (3.15), usada de forma que possa eliminar os efeitos de dimensão finita.	40
A.1	Rugosidade $W(t)$ como em função do tempo t , para diferentes tamanhos do substrato L obtidos para o modelo DARS onde em (a) temos o ajuste de curva dado pela EUR e em (b) o ajuste via lei de potência.	44
A.2	Rugosidade $W(t)$ em função do tempo t , para vários tamanhos de L , obtidos para o modelo ET a partir dos ajustes de curva EUR em (c) e pelas leis de potência em (d).	44

A.3	Rugosidade $W(t)$ versus o tempo t com variação do tamanho do sistema L , calculados com os devidos ajustes de curva para o modelo SS por meio da EUR em (e) e das leis de potência em (b).	45
A.4	Expoente de crescimento β versus o comprimento do substrato L , ajustado com a EUR em (a) e via lei de potência em (b). É perceptível que quando $L\beta\infty$ então β_L converge para o valor esperado de β	46

Lista de Tabelas

1.1	Expoentes de escala para cada classe de universalidade em 1 + 1 dimensões.	14
3.1	A tabela mostra os valores encontrados de β , rugosidade de saturação W_{sat} e tempo de saturação t_{sat} , para os modelos ET, SS e DARS com $L = 1024$, parâmetros ajustáveis obtidos mediante o uso de Leis de potência e pela EUR que refere-se a Equação Universal da Rugosidade, equação (3.1). O número, (...), representa o erro obtido em cada parâmetro.	31
3.2	Valores do expoente dinâmico z para os modelos ET, SS e DARS obtidos pelos ajustes LP e EUR.	33
3.3	Valores do expoente de rugosidade α para cada modelo, obtidos por meio da aplicação dos ajustes de curva (3.4) aos dados de W_{sat} fornecidos via EUR e LP.	35
3.4	Valores do expoente de rugosidade α para cada modelo, obtidos por meio da aplicação do ajuste de curva à Eq. (3.4), na terceira coluna temos os valor de α com C_2 ajustável já na última coluna a constante C_2 assume um valor fixo dado na Eq. (3.9).	37
3.5	Valores do expoente de rugosidade α calculados por meio da função de correlação, Eq. (3.12).	40
A.1	Valores de β para os modelos ET, SS e DARS obtidos pelos ajustes Leis de potência e EUR.	46

Lista de Símbolos

D	intensidade do ruído, p. 10
L	tamanho do substrato, p. 7
$W(t)$	rugosidade, p. 4
W_{sat}	rugosidade de saturação, p. 5
α	expoente de rugosidade, p. 8
β	expoente de crescimento, p. 8
δ	delta de Dirac, p. 11
$\eta(\mathbf{x}, t)$	ruído branco, p. 10
η	diferença entre as alturas dos vizinhos, p. 25
λ	crescimento lateral da superfície, p. 12
ν	tensão superficial, p. 10
ξ	comprimento de correlação, p. 38
b	fator de escala, p. 11
d	dimensão, p. 11
d_f	dimensão fractal, p. 14
f	função de escala, p. 9

h	altura, p. 2
$h(i, t)$	altura do sítio escolhido, p. 6
$h_{i+1}(t)$	altura do sítio posterior, p. 7
$h_{i-1}(t)$	altura do sítio anterior, p. 7
p	probabilidade de um sítio ser mínimo, p. 25
q	probabilidade de o sítio ser máximo, p. 25
t_{sat}	tempo de saturação, p. 5
x	direção espacial, p. 6
z	expoente dinâmico, p. 9

Lista de Abreviaturas

C_i	Constante ajustáveis $C_1, C_2 \dots C_n$, p. 32
ACs	Autômatos Celulares, p. 15
DARS	Deposição Aleatória com Relaxação Superficial, p. 17
DA	Deposição Aleatória, p. 6
DB	Deposição Balística, p. 6
ET	Modelo de Etching, p. 17
EUR	Equação Universal de Rugosidade, p. 30
EW	Edwards-Wilkinson, p. 10
KPZ	Kardar, Parisi e Zhang, p. 12
LP	Leis de potência, p. 31
SS	Single-step, p. 4
TFD	Teorema de flutuação dissipação, p. 42

Capítulo 1

Introdução

1.1 Crescimento de Interfaces

O crescimento de superfícies é um fenômeno amplamente estudado pela ciência, devido ao seu grande número de aplicações em várias áreas de conhecimento como na física, biologia e química. Fenômenos de crescimento podem ser encontrados na formação de membranas celulares e crescimento bacteriano [1, 2, 3, 4, 5], de filmes finos [6, 7] e dinâmica de Spins [8]. Em particular, um dos mais estudados são os processos de deposição de partículas [9, 10, 11, 12] como, por exemplo, o de flocos de neve em uma superfície lisa, formações de dunas, corrosão de materiais [13, 14], entre outros. Dessa maneira, os fenômenos de crescimento de superfícies têm sido estudado tanto do ponto de vista experimental [7, 15] quanto teórico [9, 16]

1.1.1 Altura e Rugosidade

Definindo interface como o limite entre dois sistemas (superfície e o meio), o crescimento de uma superfície seria a alteração na configuração desse limite. Para estudar essa dinâmica de crescimento da superfície é preciso definir duas funções relacionadas a mesma. O significado de rugosidade se refere a uma propriedade perceptível, onde é possível fazer a distinção de relevo entre as superfícies. Cotidianamente podemos notar a diferença entre a superfície de uma peça de cerâmica

(menos rugosa) e o asfalto (mais rugosa), sendo a diferença entre essas duas superfícies a variação da altura h entre os pontos que delimitam essas superfícies [9, 17].

Observe que na Figura 1.1 (a) (lado esquerdo), a altura se comporta como uma função contínua, isto é, para cada ponto da superfície existe um valor de altura onde temos uma deposição de partículas (flocos de neve) em uma superfície lisa (janela de vidro) onde h_1 e h_2 são as ilustrações de duas alturas.

No entanto, em alguns casos, a investigação de crescimento é feito considerando o estado como sendo discreto como mostrado na Figura 1.1 (b) (lado direito), onde consideramos a altura da superfície h , o tamanho do substrato L e altura média definida por $\bar{h}(t)$ que é a média das alturas nas elevações da superfície em um determinado tempo (t), sendo representado por uma linha horizontal em vermelho. Assim a altura média assume a seguinte forma:

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h(i, t), \quad (1.1)$$

onde $h(i, t)$ representa a altura de um determinado sítio na posição i (i assume valores discretos) e a soma é feita sobre todos os sítios da superfície no tempo t .

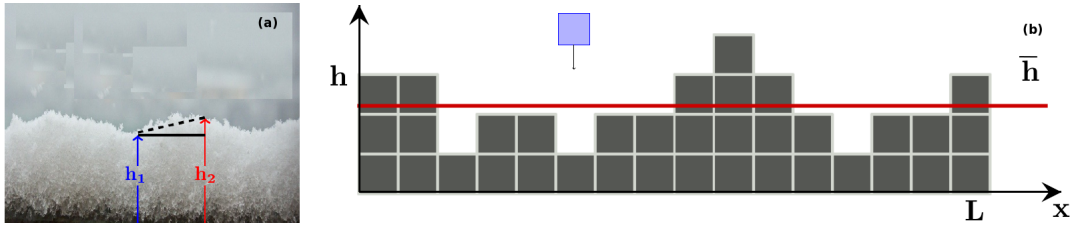


Figura 1.1: Exemplos de deposição: (a) (lado esquerdo) mostra a deposição de flocos de neve em uma janela de vidro. (b) (lado direito) temos a representação de um substrato discreto, com h em função de L , na direção espacial x , num dado tempo t . Além disso nota-se a indicação do referencial de altura média $\bar{h}(t)$ pela reta em vermelho. Figura adaptada da [17].

Em seguida, a outra grandeza que definimos é a rugosidade $W(L, t)$. A mesma possui a característica de quantificar as flutuações na altura da interface. Do ponto

de vista matemático corresponde ao desvio padrão da altura média $\bar{h}(t)$:

$$W(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h(i, t) - \bar{h}(t)]^2}. \quad (1.2)$$

É possível observar na Figura 1.1 (b) que quando a superfície do sistema for inicialmente plana (altura iguais) a rugosidade é nula. Porém, quando as partículas começam a ser depositadas no substrato, podemos ter acesso a outras alturas fazendo com que haja flutuações em torno da média, gerando assim um aumento da rugosidade.

Já na Figura 1.2 (a) e (b) apresentamos como exemplo o crescimento de filmes finos de telureto de cádmio (*CdTe*). As partículas de *CdTe* foram depositadas sobre substratos de Silício *Si(001)* (pois é um material que interage muito pouco com as partículas de *CdTe* fazendo com que não altere as propriedades do mesmo). O crescimento desse filme fino foi realizado por meio de uma técnica específica (*Hot-wall-epitaxy*) que possibilita ter um controle da taxa de crescimento desse filme, ou seja, é possível controlar o quanto de partículas são depositadas nesse substrato. Esse experimento é de grande importância, uma vez que, nas dimensões nano, os materiais apresentam propriedades físicas fora do comum por conta do confinamento quântico.

O *CdTe* na sua forma cristalina é um semicondutor de *gap* direto de energia se o vetor de onda do nível mais alto da banda de valência coincide com a da banda de condição, tornando um poderoso material para células solares, detectores de raios-x, raios gama e outros dispositivos optoeletrônicos [7]. Então, como exemplo a Figura 1.2 (a) e (b) mostram a rugosidade da superfície. Grandeza que nos fornece um valor quantitativo da aspereza de uma superfície em função do tamanho do substrato, eixo *x* e *y* para dois instantes de tempo, onde o resultado da rugosidade foi medida com uma margem de tempo distintas. Em (a) temos $t = 60$ min e em (b) $t = 240$ min. É possível notar que na Figura 1.2 (b) o substrato é totalmente coberto pelas partículas que foram depositadas e sofreram relaxação até saturar. Logo as Figu-

ras (a) e (b) 1.2 representam a rugosidade da superfície desse filme fino e diferem quanto as alturas entre as partículas que são depositadas, pois na imagem (b) como há saturação do sistema a rugosidade se torna mais suave. No que se segue apresen-

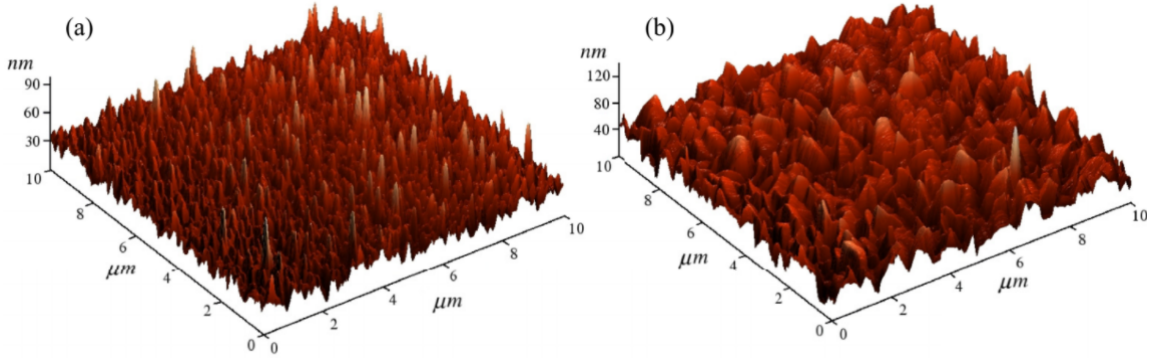


Figura 1.2: As figuras mostram as morfologias de superfície típicas de filmes finos. De Almeida *etal.* [7], com permissão de Physical Review B.

tamos os conceitos e propriedades fundamentais para analisar o comportamento do crescimento de uma superfície como altura e rugosidade da mesma. A rugosidade é uma das mais importantes propriedades, pois está relacionada com o processo avaliativo do comportamento temporal do sistema, veremos isso mais adiante. O exemplo exposto nas Figuras 1.2 (a) e (b) mostram a importância de se descrever as morfologias dessas superfícies, pois nos ajuda a compreender as propriedades físicas e prever as condições para o crescimento de novas estruturas.

Desconsiderando as singularidades que cada sistema possa ter e levando em conta apenas a influência na deposição de partículas sobre sítios vizinhos, a rugosidade evolui de maneira qualitativa como pode ser visto na Figura 1.3.

A Figura 1.3 mostra a rugosidade em função do tempo, $W(t)$, para o Single-Step (modelo SS), modelo esse que explanaremos melhor no Capítulo 2 [18, 19] em $1 + 1$ dimensões, a primeira dimensão indica a dimensão espacial x , onde o “tamanho” da superfície é L , já a segunda dimensão refere-se a direção do crescimento definido como a altura h da superfície. O tempo é medido em camadas de deposição, de modo que para $t=1$ uma camada foi depositada. Aqui $L=256$ e o resultado é uma média sobre 10^4 experimentos, onde o número de experimentos corresponde ao número de simulações na rede. Observamos três escalas temporais: inicialmente ela cresce

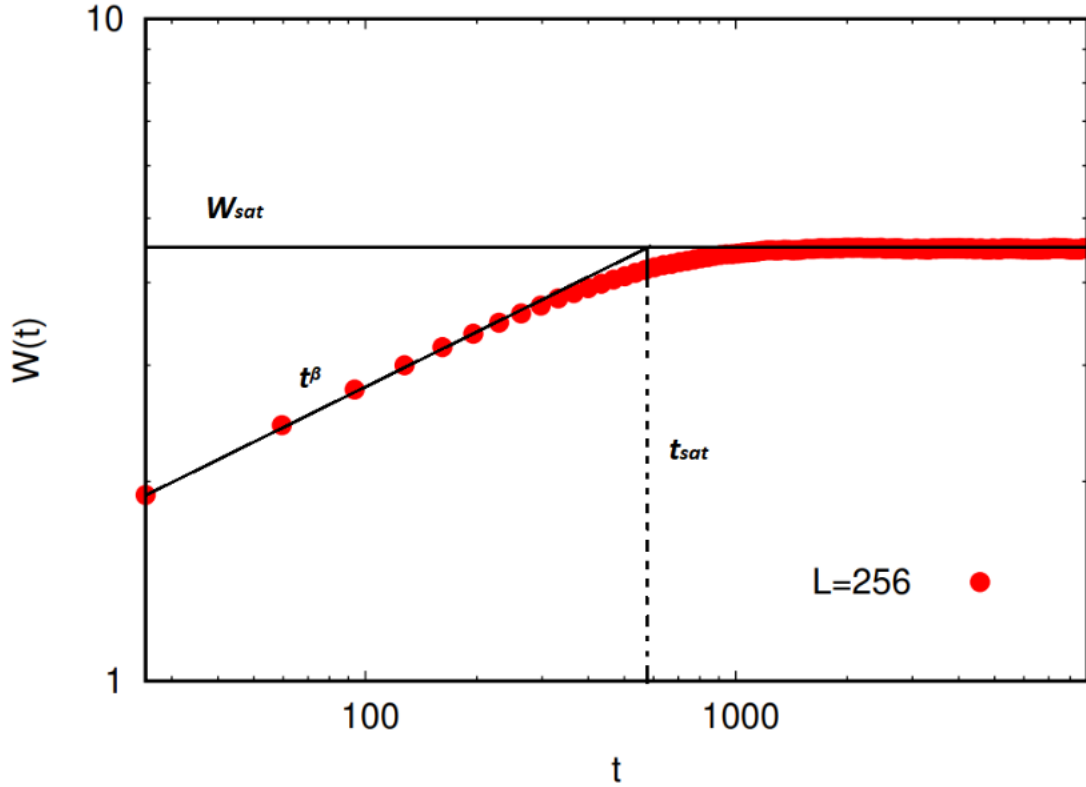


Figura 1.3: Gráfico da evolução da rugosidade em uma superfície de dimensão $1 + 1$. Os pontos em vermelho representam uma média com relação ao número de simulações. As linhas em preto representam o regime de crescimento t^β , o tempo de saturação t_{sat} e a rugosidade de saturação W_{sat} encontrada no regime de saturação.

como uma lei de potência, $W(t) \sim t^\beta$, o expoente β é o expoente de crescimento, depois a função muda a curvatura para um tempo t_{sat} , que é proporcional a L^z , onde o expoente z se refere a dinâmica do sistema, denominado tempo de saturação. Posteriormente, para um tempo $t > t_{sat}$, o sistema atinge a saturação com um $W_{sat} \sim L^\alpha$, sendo α o expoente de rugosidade da superfície, representado pela linha paralela ao eixo $W(t)$.

Observe que na Figura 1.3 a inclinação da curva $W(t)$ no início do crescimento/deposição é maior que nos tempos seguintes. Esse comportamento denota a propagação de correlações superficiais, isto é, as partículas interagem com a sua vizinhança e a partir disso procuram um mínimo local de energia entre os vizinhos na qual essa partícula foi depositada. Sistemas que apresentam esse tipo de correlação possuem uma característica em comum, como, por exemplo, a saturação da rugosidade após algum momento [20]. O comportamento observado na Figura 1.3 é encontrado em diversos

sistemas físicos, tanto do ponto de vista experimental [1, 6, 7, 15, 21, 22, 23, 24, 25] quanto através de simulações computacionais [11, 12, 16, 17, 18, 26, 27]. Outros exemplos de modelos estudados em autômatos celulares (ACs) [28] são a Deposição aleatória (DA) e Deposição balística (DB).

O modelo de Deposição Aleatória (DA) [9, 17] é considerado um dos mais simples, pois não existe mecanismos de correlação entre as partículas. A Figura (1.4) define o crescimento da DA. A partir da escolha aleatória de um sítio sobre uma superfície, a partícula cai verticalmente e ao atingir a superfície se fixa a essa.

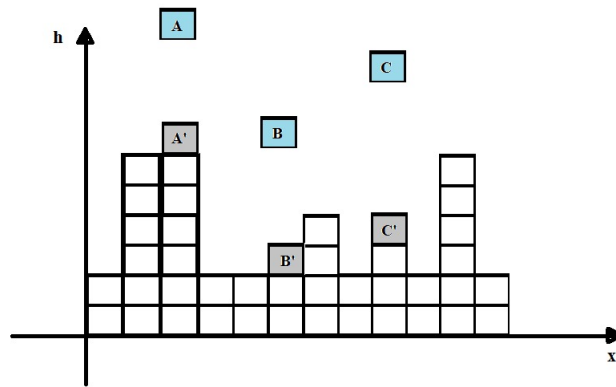


Figura 1.4: Esquema do modelo de Deposição Aleatória. Onde h é a altura do substrato e x é a direção espacial na qual se o tamanho do substrato L é fixo. As três partículas (quadrados azuis)(A, B e C) são liberadas de posições aleatórias acima da superfície, posteriormente, tais partículas são depositadas sobre o topo das colunas abaixo delas (quadrados cinzas)(A', B' e C').

Observa-se que nesse tipo de crescimento/deposição o fato da inexistência de correlações entre as partículas faz com que não haja saturação do sistema e consequentemente a rugosidade cresce de maneira ilimitada. O modelo de deposição aleatória é simples, pois escolhido um sítio i aleatoriamente, e aumentando a sua altura $h(i, t)$ em uma unidade: $h(i) = h(i) + 1$.

Já o modelo de Deposição Balística (DB) [8, 9, 17, 29] foi introduzida como um modelo de agregados coloidais, que apresenta um agregado com poros no volume formado. Esse modelo inclui correlações entre os vizinhos mais próximos e correlações com os vizinhos mais distantes. A Figura (1.5) representa esquematicamente para a deposição de partículas desse modelo, onde h é a altura do substrato e x é a

direção espacial e L é o tamanho do substrato.

Uma partícula é sorteada para cair aleatoriamente em uma posição da superfície. A partícula segue uma trajetória vertical e ao encontrar a superfície, fixa-se. Quando este elemento encontra o substrato ou uma partícula vizinha, ela estagna [9]. Os elementos depositados formam um agregado gerando uma formação de uma estrutura rugosa, com uma geometria diferenciada que evolui com o tempo.

Após o sorteio aleatório do sítio onde a partícula será depositada, a altura na qual ela irá se fixar depende dos sítios vizinhos ao sítio sorteado, assim tem-se que: $h_i(t+1) = [h_{i-1}(t); h_i(t)+1; h_{i+1}(t)]$, onde $h_{i-1}(t)$ é o vizinho anterior e $h_{i+1}(t)$ é o vizinho posterior. Esse modelo introduz correlações não lineares no sistema, produzindo estrutura rugosa na superfície.

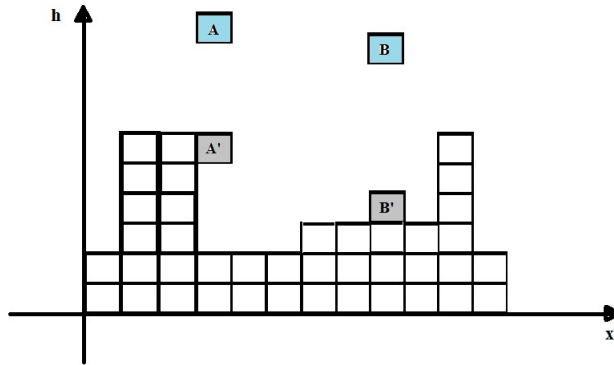


Figura 1.5: Esquema do modelo de Deposição Balística.

De um modo geral, existem vários modelos que descrevem o crescimento de superfícies, todos eles considerando o crescimento de estruturas formadas por partículas idênticas [9]. Ao se estudar os modelos de crescimento e as equações que regem seu comportamento, é necessário definir alguns parâmetros essenciais.

Observe que nos modelos aqui apresentados, L determina o tamanho linear da rede e d a dimensão espacial dessa rede; para uma rede unidimensional temos L sítios. Objetiva-se sempre encontrar grandezas que possam caracterizar uma superfície ou interface, como a rugosidade da superfície, a altura de uma determinada posição na rede.

1.1.2 Leis de Escala e Expoentes Dinâmicos

Nesta seção são apresentados os comportamentos típicos observados quando lidamos com o crescimento de superfícies: leis de potência ou de escala. Uma característica geral observada em escalas temporais longas é a de que a rugosidade apresenta dependência com relação ao tamanho do sistema. A medida que o tamanho do substrato cresce, o tempo de saturação aumenta assim como o valor da rugosidade de saturação. Logo é possível sintetizar o comportamento da rugosidade observado na Figura 1.3 através de três expoentes críticos.

Note que na Figura 1.3 a dinâmica inicial do sistema, ou seja, no regime de crescimento a rugosidade, $W(t)$ cresce segundo uma lei de potência:

$$W(L, t) \sim t^\beta \quad \text{para} \quad t \ll t_{sat}, \quad (1.3)$$

onde o expoente β é **expoente de crescimento**. Esse expoente caracteriza a dinâmica temporal da rugosidade da superfície, $W(L, t)$ e o tempo de saturação, t_{sat} (tempo entre os dois estados). Após esse tempo, notamos que o valor da rugosidade entra em um regime estacionário definido como rugosidade de saturação, W_{sat} . Para tempos longos a rugosidade de saturação $W_{sat}(L, t)$ cresce com o tamanho do sistema L segundo uma lei de potência:

$$W_{sat}(L, t) \sim L^\alpha \quad \text{para} \quad t \gg t_{sat}. \quad (1.4)$$

O expoente α é chamado de **expoente de rugosidade** e está diretamente relacionado a dinâmica de saturação. Logo após o regime de crescimento é possível notar que existe uma região de transição onde $t \simeq t_{sat}$ e assim como a rugosidade de saturação o tempo de saturação t_{sat} também se comporta segundo uma lei de potência em relação ao tamanho do sistema L . Assim obtemos

$$t_{sat} \sim L^z, \quad (1.5)$$

onde z é o **expoente dinâmico**.

Como dito anteriormente, a saturação da rugosidade em um sistema de crescimento é devido a dependência que um sítio tem com relação aos seus vizinhos, denotando assim uma correlação entre as alturas da interface. Assim, as flutuações em torno de um valor fixo diminui e a rugosidade para de crescer.

Esses expoentes estão ligados de alguma forma entre si. A fim de encontrar uma relação entre esses expoentes, Family e Vicsek [30] propuseram uma lei de escala capaz de colapsar todas as curvas de crescimento obtidas em uma única função. De tal forma que

$$\frac{W(L, t)}{W_{sat}(L, t \sim t_{sat})} \sim f\left(\frac{t}{t_{sat}}\right), \quad (1.6)$$

onde $f\left(\frac{t}{t_{sat}}\right)$ é chamada função de escala. Se substituirmos as Equações (1.4) e (1.5) na Equação (1.6) encontramos a relação de escala de Family-Vicsek [31]:

$$W(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (1.7)$$

Na Figura 1.3, se observamos a evolução da rugosidade $W(t)$ ao se aproximar de t_{sat} , ainda no regime de crescimento, temos $W(t) \sim t_{sat}^\beta$. Vimos que após o tempo t_{sat} o sistema deixa de crescer e atinge o estado de saturação, fazendo com que a rugosidade inicial assuma a seguinte igualdade:

$$W(t) = W_{sat}. \quad (1.8)$$

Sabendo que $W_{sat} \sim L^\alpha$, $W(t) \sim t_{sat}^\beta$ e $t_{sat} \sim L^z$, temos que a partir dessas relações é possível obter $t_{sat}^\beta \sim L^\alpha$. Substituindo essas relações em (1.8) podemos concluir que $L^{\beta z} \sim L^\alpha$, logo temos $\beta z = \alpha$ que segue a relação universal:

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (1.9)$$

Essa relação deixa explícita que existe uma dependência entre os expoentes de crescimento, α , β e z , sendo válida em qualquer processo de crescimento que obedeça

à relação de Family-Vicsek [31]. Quando sistemas de crescimento distintos apresentam propriedades similares, como quando geram os mesmos expoentes críticos, é dito que esses sistemas pertencem a mesma classe de universalidade [9]. Então, é possível classificar os diversos tipos de dinâmica de superfície e estabelecer a conexão entre os mais diversos sistemas físicos.

1.2 Equações de Crescimento

Nesta seção vamos apresentar as equações de Edwards-Wilkinson e Kardar, Parisi e Zhang. Ambas são equações diferenciais estocásticas que descrevem o comportamento de crescimento de superfícies através do tempo. Essas equações constituem a base teórica para o fenômeno de crescimento. Neste trabalho estamos interessados principalmente em estudar os fenômenos de crescimento que apresentam em seus sistemas um regime de saturação após um certo tempo longo.

1.2.1 Equação de Edwards-Wilkinson

Diante do exposto acima a equação de Edwards-Wilkinson (EW) é uma das equações mais simples de crescimento linear, proposta por Sir. Edwards e Wilkinson em 1982 [32], visando modelar a evolução de interfaces rugosas. Essa equação descreve a relaxação sobre uma superfície e as flutuações aleatórias no processo de deposição.

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(x, t) + \sqrt{D} \eta(\mathbf{x}, t), \quad (1.10)$$

onde ν , chamada de *tensão superficial*, é uma constante positiva (quanto maior for o seu valor, mais rapidamente o sistema será suavizado) e D é uma constante que mede a intensidade do ruído. O ruído branco $\eta(\mathbf{x}, t)$ é o termo responsável pela aleatoriedade do sistema e por definição possui a propriedade de ter a flutuação média nula:

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0. \quad (1.11)$$

Usamos o ruído branco pelo fato de que a delta que se encontra nas equações é não correlacionada, ou seja, não altera a altura média o que faz com que todas as frequências contribuam de maneira igual, suavizando assim o sistema. Em seguida temos na Equação 1.12, que representa uma média em relação ao tempo com ausência de correlações espaciais-temporais, onde a média sobre o produto é nula em todos os casos, exceto quando $t = t'$ e $x = x'$. Assim temos,

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2\delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t'), \quad (1.12)$$

onde δ é a função delta de Dirac e d é a dimensão do substrato.

Por conta da simplicidade da Eq. de EW, (1.10), que descreve o crescimento de superfícies respeitando princípios de simetria, podemos obter os expoentes α e β , através de argumentos de escala definidos nas Eqs.(1.13)-(1.15). Esses argumentos são úteis em situações em que as soluções exatas não estão disponíveis, ou seja, não podem ser encontrados de maneira analítica. Para isto, foram considerados as seguintes transformações de escala [9]:

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = b\mathbf{x} \quad \text{reescala na horizontal,} \quad (1.13)$$

$$h \rightarrow h' = b^\alpha h \quad \text{reescala na vertical,} \quad (1.14)$$

$$t \rightarrow t' = b^z t, \quad \text{reescala de tempo} \quad (1.15)$$

onde b é um fator de escala. De modo que a Eq. (1.10) deve ser invariante sobre essas transformações. De maneira geral substituindo as Eqs. (1.13)-(1.15) em (1.10) é possível encontrar de maneira direta os expoentes de crescimento: rugosidade α , crescimento β e dinâmico z :

$$\alpha = \frac{2-d}{2}, \quad \beta = \frac{2-d}{4} \quad \text{e} \quad z = 2 \quad (1.16)$$

Esses são os expoentes de crescimento vinculados a classe de EW. Observe que eles dependem do número de dimensões d da interface. Então, para $d = 1$, os expoentes

assumem os seguintes valores:

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{1}{4} \quad \text{e} \quad z = 2. \quad (1.17)$$

Valores encontrados em simulações computacionais corroboram com os mostrados aqui. Note que $d = 2$ é o limite superior do modelo de EW. No Capítulo 2, estudamos um modelo de automata celular estocástico que corresponde a EW.

1.2.2 Equação de Kardar-Parisi-Zhang

A equação formulada por Kardar, Parisi e Zhang [33] (KPZ) consiste em uma extensão da equação linear de Edwards-Wilkinson [9, 32], onde um termo não-linear $\frac{1}{2}\lambda(\nabla h)^2$ é adicionado, esse termo é responsável por um crescimento lateral da superfície [33, 34, 35]. Deste modo a equação KPZ é escrita como:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \sqrt{D} \eta(\mathbf{x}, t), \quad (1.18)$$

onde λ é o parâmetro relacionado ao efeito desse termo não-linear. Note que para $\lambda = 0$ voltamos para a Eq. de EW (1.10).

Fazendo transformação de escala na Eq. KPZ (1.18) obtemos

$$\nu \rightarrow b^{z-\alpha} \nu, \quad (1.19)$$

$$\lambda \rightarrow b^{\alpha+z-2} \lambda, \quad (1.20)$$

$$D \rightarrow b^{-d/2+z/2-\alpha} D. \quad (1.21)$$

O que mostra que as três equações obtidas são incoerentes entre si, uma vez que os parâmetros ν , λ e D mudam com a escala. Situações desse tipo demandam o uso de grupo de renormalização e a determinação do fluxo de mudança dos parâmetros e dos pontos fixos. Para $d = 1$ o trabalho original de KPZ [33] determina esses expoentes como:

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{1}{3} \quad \text{e} \quad z = \frac{\alpha}{\beta} = \frac{3}{2}. \quad (1.22)$$

Desse modo, a Eq. (1.18) representa uma dinâmica não-linear que descreve vários processos de crescimento [9, 33, 36, 37]. A busca dos expoentes de crescimento ligados à Eq. de KPZ têm atraindo o interesse de muitos pesquisadores. Porém, mesmo com todos esses estudos, ainda estamos longe de ter uma teoria consolidada para a Eq. de KPZ, tornando assim a mesma um dos problemas mais difíceis da física matemática, pois mesmo nos casos unidimensionais a solução numérica da equação KPZ não é algo trivial [38, 39].

Os estudos referentes a Eq. (1.18) unidimensional mostram que a mesma está conectada com uma variedade de processos estocásticos em Física e Química. Como exemplos temos modelos de crescimento e deposição de partículas [9, 13, 17, 40], sendo um deles o modelo SS [19, 41, 42], uma ampla gama de trabalhos experimentais [1, 6, 7, 15, 25, 27, 43], mecanismos de corrosão [13, 14, 34], entre outros.

Duas das principais questões ainda em aberto são: 1) Qual é a probabilidade de distribuição de altura? e 2) Quais são os expoentes α , β e z ? Essas perguntas foram respondidas de maneira satisfatória para o caso unidimensional e recentemente [34] os expoentes foram obtidos para dimensões $d > 1$.

O que sabemos é que para sistemas que possuem dimensões onde $d > 1$, uma das formas de analisar se os expoentes fazem parte da classe de universalidade KPZ é por meio da invariância de Galileu, uma vez que a mesma é considerada constante para todas as dimensões. O trabalho original de KPZ obtém ainda a famosa invariância de Galileu [33]:

$$\alpha + z = 2, \tag{1.23}$$

Note que ela é uma “assinatura” de KPZ válida apenas para os modelos na classe de universalidade KPZ.

Durante quase 35 anos da história da Eq. de KPZ, seus expoentes só foram determinados analiticamente em $(1 + 1)$ dimensões. Muitos estudos buscam a obtenção dos expoentes de KPZ para $d > 1$. Recentemente o trabalho de Gomes Filho *et al.* [34] obteve expoentes exatos de KPZ para dimensões $2 + 1$ utilizando métodos geométricos analíticos, onde foi proposto uma superfície fractal [44, 45]. Os autores

fizeram a substituição da dimensão inteira d por uma dimensão fractal d_f , assim foi possível determinar os valores dos expoentes KPZ para $2 + 1$ dimensões. Ao associar os expoentes de crescimento a uma superfície de dimensão fractal foi encontrado:

$$\alpha = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}, \quad \beta = \sqrt{5} - 2 \quad \text{e} \quad z = d_f = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}. \quad (1.24)$$

1.2.3 Classe de Universalidade

Ao estudar as leis de escala é possível definir as classes de universalidade que está relacionada com o fato de existirem alguns fatores essenciais que determinam os expoentes característicos das relações de escala [9, 30]. Assim, sistemas diferentes, que aparentemente não apresentam quaisquer tipos de conexões entre si, se comportam de uma forma muito semelhante.

Assim, sistemas que possuem o mesmo conjunto de expoentes de crescimento estão dentro da mesma classe de universalidade. De forma bastante simples, podemos dizer que a universalidade significa que podemos desconsiderar detalhes do sistema na procura desses expoentes. O conceito de universalidade está intimamente ligado ao conceito de escala, pois a principal característica de grandezas que se comportam com uma lei de escala é sua invariância [9, 17, 20], visto que as relações de escala são utilizadas para obter os expoentes que permitem essa classificação.

Na Tabela 1.1 tem-se os valores dos expoentes de rugosidade e dinâmico associados as classes de universalidades mencionadas nesse capítulo.

Classe de universalidade	α	β	z
EW	1/2	1/4	2
KPZ	1/2	1/3	3/2

Tabela 1.1: Expoentes de escala para cada classe de universalidade em $1 + 1$ dimensões.

Como vimos em 1.2.1 para o caso unidimensional os expoentes de **EW** são encontrados por transformação de escala e os expoentes de **KPZ** a partir do grupo

de renormalização [9]. Tem-se que diversos modelos unidimensionais se enquadram nas classes de universalidade descritas na Tabela 1.1. Para **EW** temos o modelo de DARS, e para **KPZ** o modelo de DB, modelo de corrosão, entre outros.

O modelo SS pode se enquadrar tanto na classe de universalidade de **EW** quanto na de **KPZ**, porém dependem dos parâmetros que definem a dinâmica desse modelo; veremos isso de maneira mais detalhada no próximo capítulo. Existem também sistemas com $d > 1$ dimensões [13] que são classificados como pertencentes a classe de universalidade **KPZ** inclusive nos casos experimentais em $2 + 1$ dimensões [7].

1.3 Autômato Celular

Os Autômatos Celulares (ACs) [20, 26, 28, 46] consistem em ferramentas computacionais que podem representar quase todos os sistemas físicos evolutivos como compostos por elementos discretos e com interações locais. Eles são construídos sobre uma rede regular, que pode apresentar tamanho finito ou infinito. As condições de fronteira do modelo são escolhidas de forma a ditar como o mesmo interage em suas extremidades. O uso de ACs é interessante, pois, se apresenta como uma ótima ferramenta computacional para a modelagem de sistemas físicos, uma vez que podemos trabalhar com sistemas discretos [35, 47, 48].

Neste trabalho o fenômeno de crescimento/deposição de partículas foram estudados através de modelos de ACs, pois, são capazes de reproduzir a propagação de interfaces rugosas. Os ACs estudados aqui são do tipo probabilísticos, também conhecidos como autômatos celulares estocásticos e são sistemas cuja atualização é determinada a partir de algumas distribuições de probabilidades.

1.4 Objetivos

Esta dissertação tem como objetivo geral determinar o valor do expoente de rugosidade, α , mais próximo do valor exato em $(1+1)$ dimensões através de diferentes métodos de análise.

1.4.1 Objetivos específicos

No que concerne aos objetivos específicos os seguintes foram definidos:

1. Simular modelos de crescimento/deposição utilizando autômatos celulares, estes são: o modelo de Deposição Aleatória com Relaxação Superficial, o modelo de corrosão e o modelo de Single-step, esses seram detalhados no Capítulo 2;
2. Investigar os parâmetros de crescimento através de lei de potência e Equação Universal da Rugosidade, essa equação será melhor explanada no Capítulo 3;
3. Obter os expoentes através de diferentes métodos para cada modelo investigado;
4. Apresentar e avaliar qual método fornece o melhor expoente de rugosidade.

Este trabalho se estrutura em cinco capítulos. O primeiro trata da introdução da pesquisa. No segundo capítulo apresenta a metodologia implementada para consecução da pesquisa. O terceiro capítulo expõe os resultados encontrados a partir das simulações para os três modelos em análise. O quarto capítulo, traz a conclusão do trabalho onde são destacados os principais resultados encontrados e as perspectivas de estudos futuros. Ao final dessa dissertação temos um apêndice que expõe outros resultados a fim de detalhar mais ainda o nosso trabalho.

Capítulo 2

Métodos

Neste capítulo, apresentamos modelos de autômatos celulares (ACs) [20, 28, 46], pois são uma ótima ferramenta para a modelagem de sistemas físicos. Assim o presente trabalho estuda o fenômeno de crescimento/deposição de partículas que serão estudados através de três modelos distintos de crescimento de interfaces rugosas.

Os três modelos estudados são modelo I: DARS (Deposição Aleatória com Relaxação Superficial) [9, 20, 49, 50], modelo II: ET (modelo de Etching) [13, 14, 16, 17, 51]¹ e o modelo III: Single-step (modelo SS) [18, 19]. Apresentamos esses modelos em dimensão $1 + 1$ e as definições das regras de deposição e crescimento correspondente a cada modelo.

Os modelos de ACs estudados foram implementados em linguagem de programação Fortran e desenvolvido pelo grupo de estudo do Professor Fernando Albuquerque de Oliveira. As simulações foram realizadas usando o cluster de alto desempenho. Realizamos uma revisão e estudo dos autômatos celulares unidimensionais correspondentes aos 3 modelos apresentados anteriormente.

¹Etching-model é o termo usado em inglês, mas no presente trabalho vamos usar modelo de corrosão e ET para a sigla. O Etching vem do processo de gravura usando água forte.

2.1 Descrição dos Modelos

Nos três modelos descritos a seguir todas as partículas são idênticas, onde no caso dos modelos DARS e ET as partículas são depositadas sobre um substrato unidimensional de tamanho L (tamanho da rede) e a unidade de tempo, aquele necessário para deposição de uma camada. O modelo SS segue os mesmos parâmetros do tamanho do substrato e unidade de tempo, porém as partículas não são depositadas e sim as alturas são rearranjadas obedecendo determinadas regras.

Nas Figuras 2.1 (a) e (b) têm as ilustrações das configurações iniciais utilizados em cada um dos modelos, sendo h a altura do substrato e x a direção espacial. O tamanho do substrato (isto é, o número de sítios) é fixo nessa direção. Além disso, $i+1$ e $i-1$ representam o vizinho posterior (à direita do sítio i) e vizinho anterior (à esquerda do sítio i), respectivamente. Em (a) temos uma superfície plana com todos os sítios possuindo a mesma altura. Já em (b) para o modelo SS, concluímos que a superfície possui uma altura inicial que é definida como $h_i(t=0) = (1 + (-1)^i)/2$, com i variando de 1 até L .

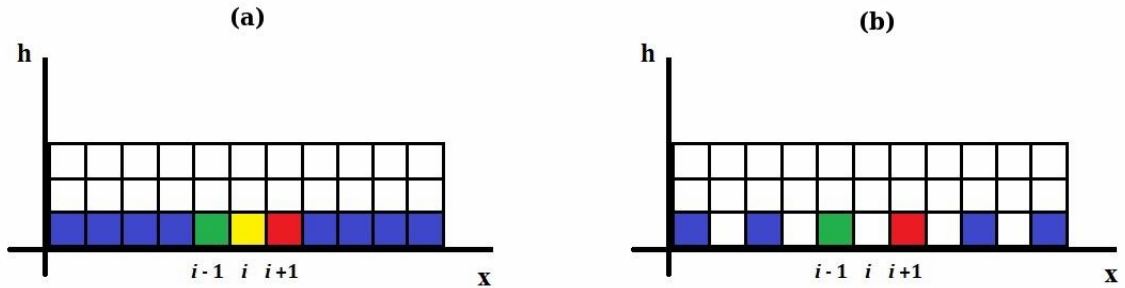


Figura 2.1: Representação esquemática da configuração inicial dos modelos estudados, em (a) observa-se os modelos DARS e ET com $h_i(0) = 0$ onde o sítio amarelo representa o sítio (i), o sítio vermelho o sítio $i+1$ e o sítio verde o sítio $i-1$. Na figura (b) tem-se a representação do modelo SS com $h_i(0) = (1/2 + (-1)^i)/2 = [1 + (-1)^i]/2$ onde o sítio (i) está representado no sítio em branco e os vizinhos $i+1$ e $i-1$ nos sítios vermelho e verde, respectivamente.

2.1.1 Modelo I: Deposição Aleatória com Relaxação Superficial-DARS

O modelo DARS [9, 10, 20, 49, 50] é um modelo de deposição que inicialmente se assemelha com o modelo de Deposição Aleatória [9, 20] descrito no capítulo anterior, porém, nesse modelo temos a presença de correlações espaciais onde a rugosidade do sistema cresce segundo uma lei de potência. Suponha que as partículas que estão sendo depositadas possuem energia suficiente para que ocorra uma relaxação superficial antes de se fixarem na superfície, ou seja, elas escolhem uma posição com menor altura com relação à vizinhança que seria um mínimo local de energia para que ocorra a deposição.

A presença das correlações espaciais (interação com os vizinhos) suaviza a interface do sistema ao longo do processo, isto é, fazendo com que a rugosidade não cresça de maneira ilimitada, desse modo, ocorre a saturação da rugosidade na superfície. A Figura 2.2 apresenta a evolução da rugosidade $W(t)$ como função do tempo para o sistema do modelo DARS. Foi utilizado um substrato de tamanho $L = 256$ sítios e tomamos uma unidade de tempo após L realizações, ou seja, o tempo necessário para fazer a varredura em toda a rede. A rugosidade cresce até atingir um valor constante W_{sat} , denotando assim que a presença de saturação no sistema está relacionada com a existência de correlação espacial. Considera-se esse comportamento como padrão em sistemas onde a rugosidade atinge um estado de saturação, pois aparece tanto em experimentos quanto em simulações.

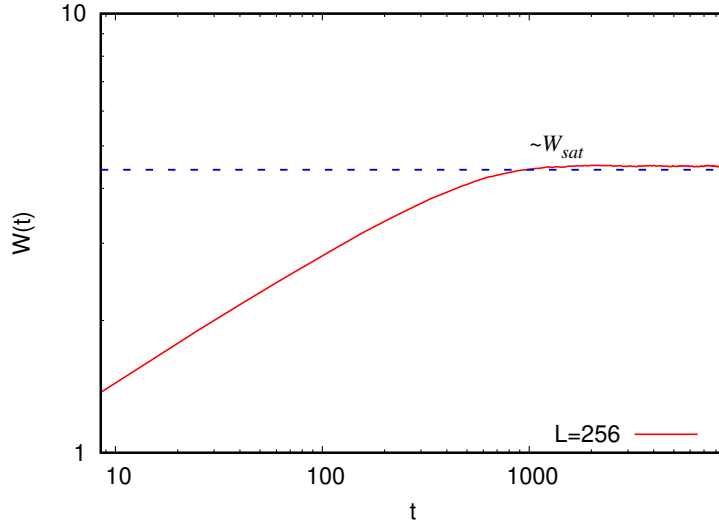


Figura 2.2: Evolução temporal da rugosidade em escala log-log, onde a curva vermelha é uma média sobre o número de simulações. Nota-se que após um certo tempo (t) a rugosidade do sistema para de crescer atingindo o valor W_{sat} , linha pontilhada em azul, ao saturar, esse gráfico exemplifica um processo de crescimento correspondente ao modelo DARS.

Nesse tipo de crescimento de superfície, em um sítio aleatório (i) é depositada uma partícula. Logo em seguida ela sofre uma relaxação superficial, ou seja, ela não adere imediatamente ao local. Após esse processo de relaxação, a partícula interage com seus vizinhos próximos ($i + 1, i - 1$) e depois se desloca para um sítio que possui uma altura menor e só então ela fixa ao local. Porém, se o sítio inicialmente sorteado for um mínimo local ou se seus vizinhos (anterior e posterior) tenham todos a mesma altura ($h_i = h_{i-1} = h_{i+1}$), a partícula é imediatamente depositada. Caso isso não aconteça inicialmente ele seguirá algumas regras definidas a seguir.

A Figura 2.3 ilustra como ocorre o processo de deposição e interação das partículas desse modelo, além das regras que o definam seguem abaixo:

- Regra 1: No instante de tempo t , sorteia-se um sítio aleatório i ;
- Regra 2: Se $h_{i-1}(t) > h_i(t) > h_{i+1}(t)$, então $h_{i+1}(t + 1) = h_{i+1}(t) + 1$;
- Regra 3: Se $h_{i-1}(t) < h_i(t) < h_{i+1}(t)$, então $h_{i-1}(t + 1) = h_{i-1}(t) + 1$;
- Regra 4: Se $h_i(t) \leq h_{i\pm 1}(t)$, então $h_i(t + 1) = h_i(t) + 1$;

- Regra 5: Se $(h_{i\pm 1}(t)) < h_i(t)$, então o sistema tem a probabilidade de 50% de escolher qualquer um dos sítios vizinhos.

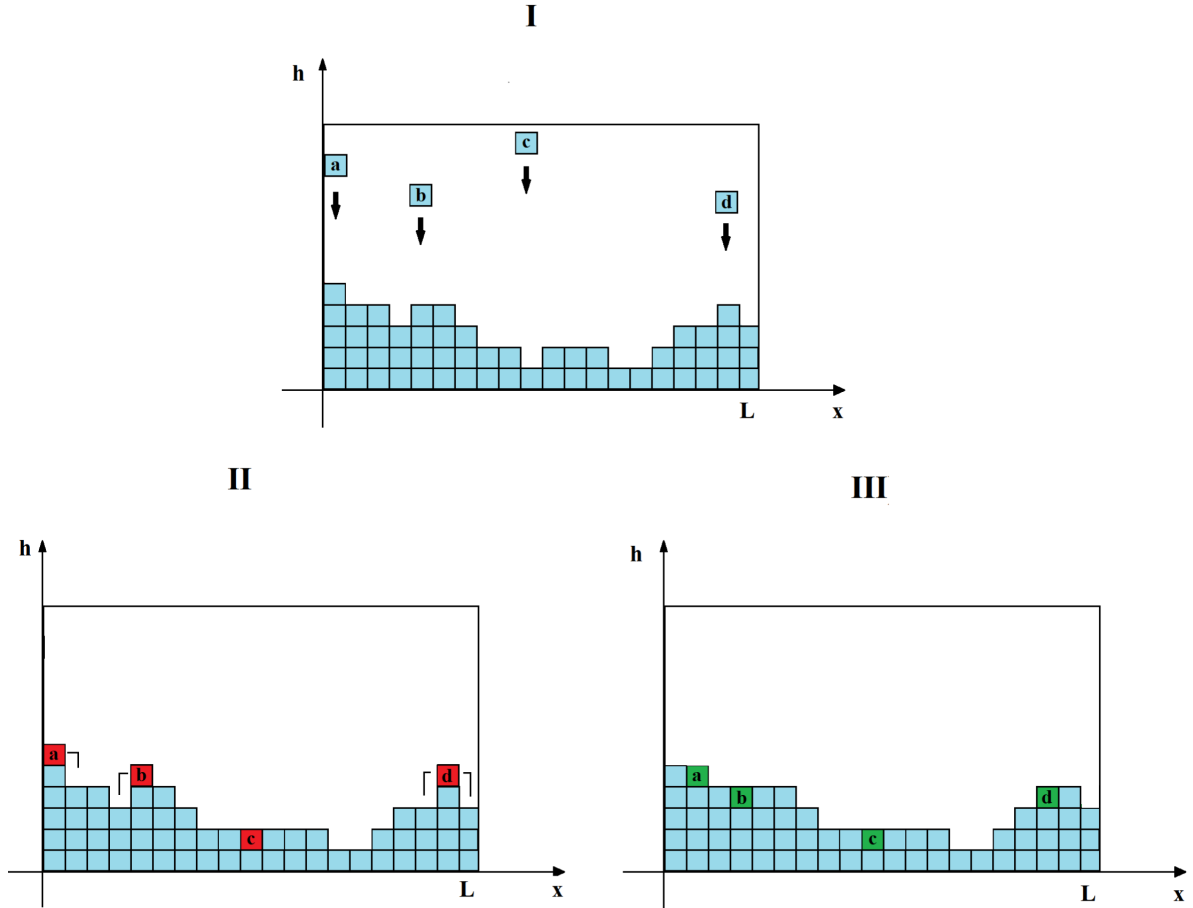


Figura 2.3: Regras para a Deposição Aleatória com Relaxação Superficial. Com h sendo a altura da superfície e x a direção em que o substrato de tamanho L se encontra fixado.

Na Figura 2.3 I) vamos considerar que as quatro partículas (quadrados azuis a, b, c e d) sejam liberadas de posições aleatórias acima da superfície: regra (1), em II) cada um dos sítios vermelhos (a), (b), (c) e (d) representam uma partícula que já foi depositada no substrato e como esse modelo considera as correlações entre os vizinhos próximos a partícula observa essa vizinhança realizando assim as demais regras.

No sítio vermelho (a) como a posição do vizinho posterior $h_{i+1}(t)$ é menor que a altura do sítio escolhido $h_i(t)$ a regra (2) é aplicada. Já no sítio (b) (quadrado vermelho) a altura do sítio escolhido $h_i(t)$ é maior que a do vizinho anterior $h_{i-1}(t)$,

logo aplica-se a regra (3). Em (c)(sítio vermelho) a altura do sítio escolhido é igual as alturas dos dois vizinhos próximos ($h_{i+1}(t)$ e $h_{i-1}(t)$), aqui a regra (4) é implementada. Por último, no sítio (d)(quadrado vermelho), tem-se que tanto o vizinho anterior ($h_{i-1}(t)$) quanto o posterior ($h_{i+1}(t)$) tem a mesma altura logo a regra (5) é considerada então é escolhido um dos sítios com igual probabilidade, ou seja, 50% de cair em qualquer um dos lados (esquerda ou direita), nesse caso a escolha foi a do vizinho anterior. Na Figura 2.3 III) nos sítios (a), (b), (c) e (d) (quadrados verdes) observamos a posição final das partículas após a relaxação.

Observe que no modelo DARS, ao contrário do modelo DA, algumas partículas que estão sendo depositadas na superfície podem mudar de posição conforme sua correlação com os vizinhos. Nesse sentido, nosso modelo incorpora um processo de relaxação que é encontrado comumente na literatura [9, 20, 49, 50], que afeta apenas a partícula que está sendo depositada.

Esse modelo também conta com condições de contorno/fronteira periódicas específicas. Desse modo, temos por exemplo, que para o caso unidimensional as alturas h são representadas por um vetor h_i para todo $i \in 1, \dots, L$ e a cada L deposições se passa uma unidade de tempo. Assim consideramos condições de contorno periódicas para sistema de $1 + 1$ dimensões, onde, o vizinho posterior do sítio $i = L$ é o sítio $i = 1$, conseqüentemente para o vizinho anterior do sítio $i = 1$, é o sítio $i = L$. Essa condição de contorno é muito utilizada em simulações, pois ajuda a reduzir os efeitos de tamanho finito. As mesmas condições de contorno são consideradas para os modelos ET e SS.

2.1.2 Modelo II: modelo de Corrosão-ET

O modelo de corrosão proposto em 2001 por Mello, Oliveira e Chaves [13], pode ser descrito como a corrosão de um sólido cristalino por um líquido corrosivo (como, por exemplo, um ácido). É possível definir corrosão como o processo destrutivo de uma superfície, causada pela ação de um meio externo, como oxidação ou de um agente químico, por exemplo. A corrosão é um processo que ocorre frequentemente

no nosso cotidiano, além de ser responsável por uma grande variedade de danos. Porém, não será feito um estudo sobre as causas e efeitos. O objetivo em estudar esse modelo é a possibilidade de associá-lo aos processos de crescimento de interfaces rugosas. Para isso, faz-se uso de simulações computacionais e, assim como no modelo DARS, é possível obter os expoentes de crescimento associados.

O modelo simula um processo de corrosão ou deposição/retirada em uma superfície de dimensão $1 + 1$ e a cada unidade de tempo t necessária para a execução de L iterações, em que é feita a deposição de L partículas, ou seja, temos uma partícula sendo depositada em um sítio aleatório i em um determinado tempo t .

As regras de corrosão para o modelo ET estão associadas a um autômato celular onde considera-se um espaço unidimensional, porém vale ressaltar aqui que esse modelo também pode ser implementado em dimensões $d > 1$ [17, 34, 52]. Em um dado instante de tempo t , um sítio (i) é escolhido de forma aleatória, que será o sítio onde o líquido vai atingir a superfície, atuando no sítio escolhido bem como nos primeiros sítios vizinhos, cuja altura do sítio i é definida por h_i , o autômato celular está sujeito as seguintes regras:

- Regra 1: No instante de tempo t , sorteia-se um sítio i aleatoriamente;
- Regra 2: $h_j(t) > h_i(t)$ faz-se $h_j(t + \Delta t) = h_i$;
- Regra 3: Se $h_i(t + \Delta t) = h_i(t) - 1$.

Onde $h_j(t)$ ou $h_j(t + \Delta t)$ corresponde a altura dos sítios vizinhos com relação ao sítio (i) escolhidos em t e $t + \Delta t$, respectivamente. Observe que no tempo, $t + \Delta t$, tem-se que $h_j(t + \Delta t) = h_i(t)$, ou seja, a altura da superfície diminui e passa a ter mesma altura do sítio (i) escolhido. A execução do algoritmo nas bordas depende das condições de contorno escolhidas. A Figura 2.4 (a),(b) e (c) mostra como ocorre esse processo. Porém, para a obtenção de seus expoentes, será necessário o uso de simulação computacional.

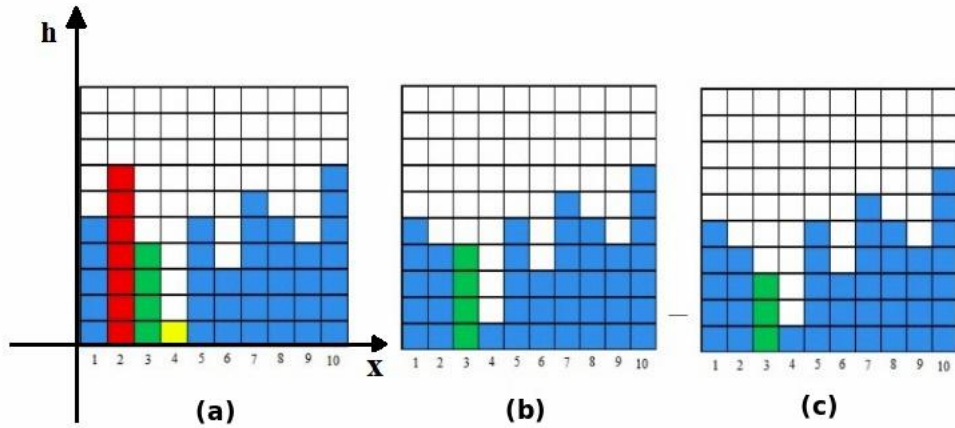


Figura 2.4: Mecanismo do modelo de etching, onde h é a altura dos sítios e x representa a direção em que o substrato de tamanho L está fixado. Figura extraída de [53].

Na Figura 2.4 é apresentada uma ilustração esquemática das regras do modelo de corrosão: em (a) é aplicado a regra 1, onde é escolhido aleatoriamente um sítio ($i=3$) no instante de tempo $t = 0$, nesse caso o sítio $i = 3$ (cor verde, $h(3) = 4$). Em seguida é aplicado a regra 2, como mostrado em (b) o sítio (3) interage com seus vizinhos, então a altura do sítio (2) será igual à altura do sítio (3) e a altura do sítio (4) permanece a mesma. Por fim, em (c) aplica-se a regra 3 onde a altura do sítio (3) diminui uma unidade.

Observe que na descrição das regras executadas nesse autômato celular consideramos que o líquido corrosivo atua em um dado sítio (i) de modo que quando o ácido toca na superfície corresponde a uma retirada e portanto, a corrosão assemelha-se a um crescimento onde o crescimento dessa interface ocorre no sentido de cima para baixo, ou seja, estamos pensando em um crescimento “negativo”, em que fazemos $h \rightarrow -h$ a fim de evitarmos alturas negativas.

A cada retirada é realizado uma série de eventos, seguindo um conjunto de regras associadas ao modelo de corrosão.

2.1.3 Modelo III: modelo Single-step-SS

O terceiro modelo que vamos definir é chamado de Single-step (SS) [18, 19, 41, 42, 45], que ganhou grande destaque na literatura por apresentar uma conexão com outros modelos como, por exemplo, modelo de Ising [8] e de vértices [8]. Os expoentes de crescimento associados a esse modelo transita entre as classes de universalidade de EW e KPZ. Ele pode ser definido como a diferença entre as alturas dos vizinhos mais próximos $\eta = h_j - h_i$ com $\eta = \pm 1$.

A evolução da superfície é executado da seguinte maneira: em qualquer instante de tempo t , é selecionado aleatoriamente um sítio (i), a altura da superfície h_i naquele local aumenta +2 com probabilidade p , se e somente se, esse sítio for um mínimo local, ou diminui -2 com probabilidade q apenas se o sítio escolhido for um máximo local.

Na Figura 2.5 (a) mostramos que a condição inicial da altura do sítio (i) é definida como: $h_i(0) = ((1 + (-1)^i)/2)$, sendo i um número inteiro, de modo que as diferenças de alturas são as exigidas pelo modelo.

O resultado exato para o coeficiente do termo não-linear na equação de KPZ, Eq. (1.18), para o modelo SS é [9, 19]:

$$\lambda = p - q, \tag{2.1}$$

Se $p = q$, então $\lambda = 0$, temos que o modelo SS se torna pertencente a classe de universalidade de EW, pois $\lambda = 0$ na Eq. de KPZ conduz à Eq. de EW, (1.10). Sabendo que a soma das probabilidades é igual a 1, segue que $p + q = 1$. Desse modo, o modelo SS pertence à classe de universalidade KPZ para $p = 1$ [18] enquanto que para $p = 0,5$ ele pertence à classe de universalidade de EW.

As Figuras 2.5 (a), (b), (c) e (d) ilustra como ocorre o processo de escolha do sítio e a interação entre os seus vizinhos, quando aplicada as seguintes regras:

- Regra 1: no instante de tempo t , sorteia-se um sítio aleatório i ;
- Regra 2: se $h_i(t)$ é um mínimo local, faz-se $h_i(t + \Delta t) = h_i + 2$ com probabilidade

p;

- Regra 3: se $h_i(t)$ é um máximo local, faz-se $h_i(t + \Delta t) = h_i - 2$ com probabilidade q.

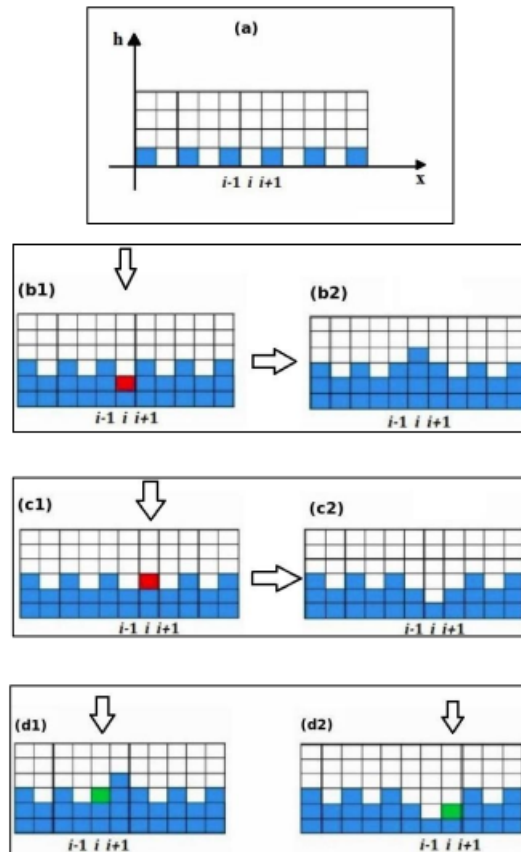


Figura 2.5: Ilustração esquemática das regras do modelo SS.

Considere que o sistema encontra-se inicialmente como ilustrado na estrutura da Figura 2.5 (a). Aplicando a regra 1, é feita a escolha aleatória de um sítio (i) (sítios vermelhos) mostrado na Figura 2.5(b1) e (c1).

O sistema observa se o sítio (i) escolhido é um mínimo local e executa a regra 2, esse esquema é representando na Figura 2.5 (b1). Após aplicada a regra 2 o sítio vermelho sobe +2 alturas, pois, é necessário manter a diferença de ± 1 entre os vizinhos próximos. Depois de aplicada essas regras a Figura 2.5 (b2) mostra o novo rearranjo do sistema com o incremento da altura do sítio (i), onde é possível perceber que o sistema ainda mantém a diferença de ± 1 entre os vizinhos.

Caso o sítio (i) escolhido seja um máximo local a regra 3 é a executada como mostrado no esquema da Figura 2.5 (c1), sendo o sítio (i) (vermelho) escolhido um máximo local, ele reduz -2 alturas. Observe a Figura 2.5 (c2), assim o sistema passa a ter uma nova configuração onde os sítios vizinhos permanecem com a diferença de ± 1 .

Note que nas Figuras 2.5 (b3) e (c3) os sítios (quadrados verdes) tem uma relação com seus vizinhos próximos do tipo onde ele é mínimo com relação ao sítio $i + 1$ e máximo para com o sítio $i - 1$, ou seja, caso esses sítios (quadrados verdes) sejam escolhidos não haverá mudança no sistema, pois é necessário que o sítio escolhido seja máximo local ou mínimo local.

Objetivando atender as metas desta pesquisa foram adotado métodos que se adéquam, sendo feitas as simulações em três etapas: a primeira é implementar os modelos de crescimento em linguagem de programação Fortran; a segunda foi realizar simulações (feitas no cluster da UnB); a partir dos resultados obtidos foi realizada a terceira etapa, que consistiu em fazer o uso de ajustes de curva para obtenção dos resultados usando o gnuplot 5.2 [54].

Depois da metodologia aplicada a esse trabalho no próximo capítulo veremos os resultados encontrados a partir dos dados obtidos pelas simulações realizadas e conseqüentemente poderemos alcançar um dos objetivos que foi proposto nesse trabalho.

Capítulo 3

Resultados

Neste capítulo apresentaremos os resultados obtidos através de simulações computacionais para cada um dos três modelos discutidos no Capítulo 2 (ET, SS e DARS). Na Seção 3.1, discutimos como podemos analisar uma curva de rugosidade e obter os parâmetros de crescimento. Já na Seção 3.2, obteremos o expoente de rugosidade α através de métodos distintos e assim poderemos definir qual método fornece um expoente de rugosidade mais próximo do valor exato.

3.1 Análise dos dados

O objetivo principal deste trabalho consiste em obter o expoente de rugosidade α através de três métodos distintos e, dessa maneira, determinar qual método resulta em um α mais próximo do valor exato, $\alpha = 1/2$, em $(1 + 1)$ dimensões. No entanto, iniciamos nosso estudo discutindo como podemos obter os parâmetros de crescimento, por exemplo, expoente de crescimento, β , tempo de saturação, t_{sat} , e a rugosidade de saturação, W_{sat} , a partir de uma curva de rugosidade.

Na Figura 3.1 mostramos em escala log-log a rugosidade $W(t)$ como função do tempo t . Os pontos representam os resultados obtidos para os modelos ET, SS e DARS em $1 + 1$ dimensões com tamanho do substrato $L = 1024$. Cada ponto representa uma média obtida sobre 2×10^4 experimentos computacionais (diferentes realizações). Além disso, em todos os casos apresentados utilizamos condições periódicas.

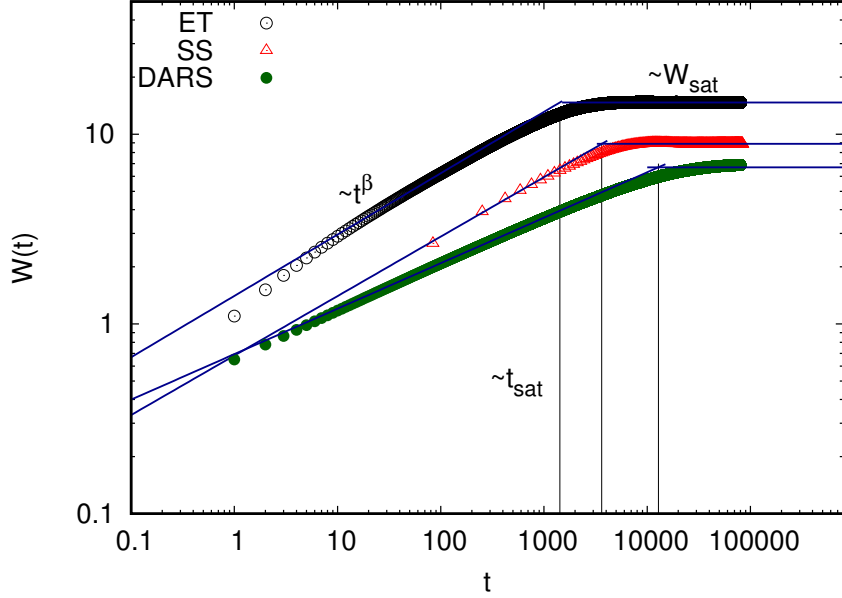


Figura 3.1: Rugosidade $W(t)$ como em função do tempo t para os modelos ET, SS e DARS em escala log-log. Os pontos representam a média sobre o número de simulações e as linhas em azul o resultado do ajuste para as Eqs. (1.3) e (1.8). As linhas na vertical denotam o valor do tempo de saturação t_{sat} .

dicas de contorno, conforme mencionando no Capítulo 2. A linha azul em cada curva de rugosidade representa o resultado do ajuste para as leis de potência apresentadas no Capítulo 1, isto é, o “método tradicional” ou o método comumente utilizado para encontrar e analisar os expoentes de crescimento que consiste no uso de leis de potência/escala [17, 30, 47]. No início do crescimento onde $t \ll t_{sat}$ a rugosidade do sistema cresce segundo uma lei de potência $W(L, t) \sim t^\beta$. Após o regime de crescimento (linhas pretas na vertical), $t \gg t_{sat}$, o sistema para de crescer e atinge o regime de saturação, nesse momento a curva de rugosidade $W(t > t_{sat}) \sim W_{sat}$.

Além disso, como podemos observar existe um momento de transição, entre o regime de crescimento e o regime de saturação, representado aqui pelo ponto onde as linhas em azul se cruzam; a partir desse ponto é possível determinar t_{sat} . Os valores dos ajustes encontrados para cada modelo estão listados na Tabela 3.1. É importante salientar que para o modelo ET encontramos $\beta_{ET} = 0,3232(7)$ e para o modelo SS, $\beta_{SS} = 0,313(8)$, assim podemos concluir inicialmente que esses são valores próximos do valor exato para KPZ, $\beta = 1/3$. Já para o modelo DARS temos, $\beta_{DARS} = 0,23964(5)$, valor próximo do valor exato para EW, $\beta = 1/4$, como esperado.

É conveniente ressaltar que t_{sat} e W_{sat} apresentam uma dependência de L , portanto a rugosidade de saturação W_{sat} cresce segundo uma lei de potência $W_{sat}(L, t) \sim L^\alpha$ e o tempo de saturação também segue uma lei de potência do tipo $t_{sat} \sim L^z$, como já foi explicado no Capítulo 1. Desse modo, para obter os expoentes α e z , precisamos variar o tamanho do sistema L .

Uma outra maneira de encontrar $\{\beta, t_{sat}, W_{sat}\}$ é fazer o ajuste de curva por meio de uma equação geral. Nos Refs. [17, 47, 55] foi proposta uma Equação Universal de Rugosidade (EUR), isto é:

$$W(t) = W_{sat} [1 - \exp(-t/t_{sat})]^\beta. \quad (3.1)$$

Dessa forma, temos uma equação geral que descreve a rugosidade como função do tempo, sendo extremamente útil pois nos fornece os valores de t_{sat} , W_{sat} e β em um único ajuste, diferentemente do “método tradicional” onde os valores desses parâmetros são obtidos separadamente.

As figuras 3.2 (a) e (b) mostram curvas de rugosidade gerados pelos três modelos: DARS, ET e SS, onde os dados usados são os mesmos da Figura 3.1. A linha contínua em azul nas figuras (a) e (b) representa o ajuste para a Equação (3.1).

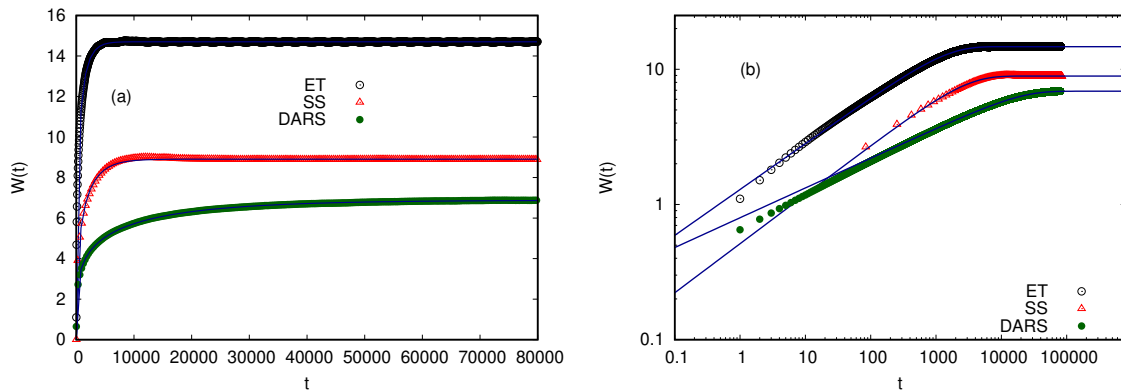


Figura 3.2: (a) Rugosidade $W(t)$ como função do tempo t . Os pontos representam os resultados das simulações enquanto a linha (azul) o resultado do ajuste para a Equação (3.1). Em (b), apresentamos os mesmos dados, porém na escala log-log.

Como podemos observar na Figura 3.2, em todos os casos apresentados a EUR

se ajusta com boa precisão aos dados, pois quando utilizamos os ajustes via lei de potência (LP) realizamos dois diferentes ajustes para obter de W_{sat} e β , sendo o valor de t_{sat} estimado a partir desses dois, enquanto que EUR nos permite obter os três parâmetros através de um único ajuste, logo o ajuste por meio da EUR se torna eficaz pelo fato de conseguirmos encontrar t_{sat} de forma direta.

Ainda cabe ressaltar que há um pequeno desvio do ajuste para tempos curtos, $t \ll t_{sat}$. Esse fato já foi observado na literatura [35] para tempos curtos, os tempos antes de iniciar as correlações entre os sítios, a rugosidade cresce como $W(L, t) \sim t^{1/2}$ conforme um processo de deposição aleatória e após as correlações espaciais a rugosidade cresce seguindo uma lei de potência.

Ao compararmos os dois ajustes utilizados (ver a Tabela 3.1) e Figuras 3.1 e 3.2, observamos que os valores de β obtidos são acurados, uma vez que, esses valores são próximos do valor exato, $\beta = 1/3$. O pior caso se refere ao SS no qual o erro relativo ao valor exato foi de 8,6%. Além disso, como podemos observar na Tabela 3.1, não há diferença significativa para o valor da rugosidade W_{sat} encontrado através das duas maneiras. Já os tempos de saturação, t_{sat} , são diferentes quando obtidos via LP e pela EUR.

Modelo	Parâmetros Ajustáveis	LP	EUR
ET	β	0,3232(7)	0,33955(9)
	W_{sat}	14,6999(5)	14,703(7)
	t_{sat}	1414,52(3)	1294,6(4)
SS	β	0,313(8)	0,362(3)
	W_{sat}	8,8931(3)	8,907(2)
	t_{sat}	3647,36(8)	2608,12(2)
DARS	β	0,23964(5)	0,22044(4)
	W_{sat}	6,6903(8)	6,8817(1)
	t_{sat}	12756,24(1)	17629,7(5)

Tabela 3.1: A tabela mostra os valores encontrados de β , rugosidade de saturação W_{sat} e tempo de saturação t_{sat} , para os modelos ET, SS e DARS com $L = 1024$, parâmetros ajustáveis obtidos mediante o uso de Leis de potência e pela EUR que refere-se a Equação Universal da Rugosidade, equação (3.1). O número, (...), representa o erro obtido em cada parâmetro.

Esse fato deve-se a obtenção direta dos valores t_{sat} por meio da EUR, isto é, t_{sat} , obtido pela Equação (3.1) tem uma definição precisa. No caso de KPZ em (1+1)

dimensões, temos:

$$\begin{aligned} W(t_{sat}) &= W_{sat} [1 - 1/e]^{1/3} \\ &\approx 0,86W_{sat}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

e para EW:

$$\begin{aligned} W(t_{sat}) &= W_{sat} [1 - 1/e]^{1/4} \\ &\approx 0,89W_{sat}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Dessa modo, no caso da EUR o tempo de saturação refere-se há uma fração da rugosidade de saturação, ou seja, refere-se a um tempo um pouco antes do sistema saturar. Por outro lado, quando obtemos t_{sat} por meio da LP, precisamos primeiro determinar o intervalo no qual t^β será ajustado que, por sua vez, traz uma certa arbitrariedade ao processo.

Portanto, para podermos definir qual ajuste de curva nos fornece o t_{sat} mais preciso, mostramos na Figura 3.3 (a) e (b) t_{sat} como função do tamanho do substrato L em escala log-log, onde $L = 2^n$ com $n = 6, 7, 8, 9$ e 10 . Simulamos o modelo DARS com 1000 experimentos para todos os valores de L . Já para os modelos corrosão e SS o número de experimentos, varia de acordo com L , isto é, ele diminui com o tamanho de substrato, sendo $ne = 10^6$ para o menor valor de L e $ne = 10^3$ para valor máximo. Os pontos representam os valores do tempo de saturação obtidos (a) a partir da EUR e em (b) obtidos via lei de potência para os modelos DARS, ET e SS. O expoente dinâmico z é obtido a partir do ajuste dado pela função $t_{sat} = C_1 L^z$ onde C_1 é uma constante ajustável.¹ Para o modelo DARS o tamanho do substrato cresce como uma função quadrática com o tamanho do sistema, L^2 . Cresce como uma função crescente $L^{3/2}$ para os modelos ET e SS.

¹ C_i com $i = 1, 2, 3, \dots$ refere-se a constantes ajustáveis.

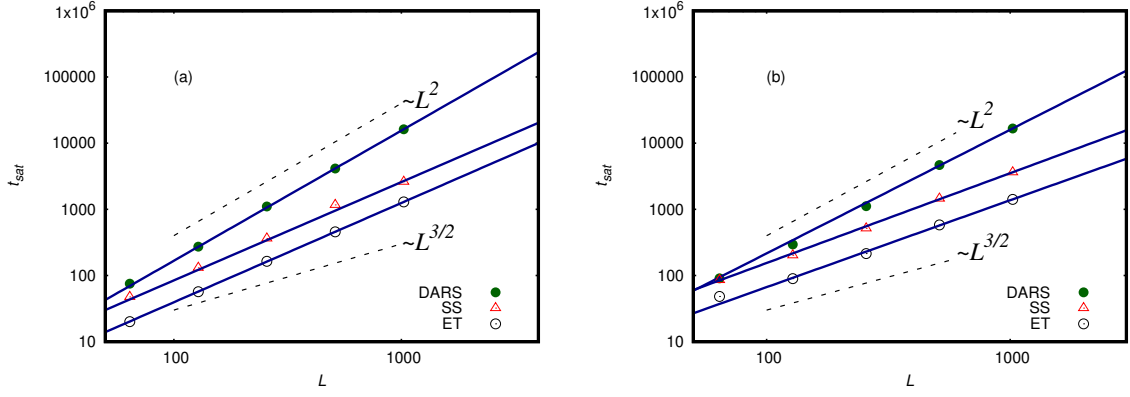


Figura 3.3: Em (a) os pontos representam os valores de t_{sat} para cada modelo, DARS, ET e SS, pontos obtidos pelo ajuste de curva da Eq. (3.1), já a linha sólida (azul) representa o ajuste Eq. (3.1) e com esse ajuste encontramos o valor do expoente dinâmico z para cada modelo. Em (b), apresentamos o mesmo expoente usando o mesmo ajuste de curva (3.1), porém com dados de t_{sat} fornecidos por LP. As linhas pontilhadas representam o valor teórico esperado.

De posse da Figura 3.3 (a) e (b) observamos que ambos os ajustes, EUR e via lei de potência, se ajustam com bastante precisão. Na Tabela 3.2 mostramos os valores obtidos do expoente dinâmico z para cada método de ajuste e, como podemos perceber, os valores de z são mais próximos do valor esperado quando obtidos pela EUR. No caso do ET temos um excelente acordo.

Desse modo, neste trabalho utilizaremos a EUR para a obtenção dos parâmetros de crescimento, pois fica evidente que o ajuste de curva dado pela EUR fornece melhores resultados.

A Tabela 3.2 temos os valores do expoente dinâmico z para cada método de ajuste.

Expoente dinâmico	LP	EUR
z_{ET}	1.31(2)	1.500(4)
z_{SS}	1.35(3)	1.486(6)
z_{DARS}	1.86(3)	1.967(8)

Tabela 3.2: Valores do expoente dinâmico z para os modelos ET, SS e DARS obtidos pelos ajustes LP e EUR.

É importante salientar que no Apêndice A mostramos os ajustes de curva bem como os valores obtidos de β para diferentes tamanhos do sistema, onde, por sua vez, obtemos um excelente valor de β para o modelo ET. No que se segue, discutiremos a obtenção do expoente de rugosidade α .

3.2 Procedimentos para obter o expoente de rugosidade

Nesta seção apresentaremos nossos resultados para o expoente de rugosidade α , obtidos por métodos distintos de análise, inicialmente faremos a aplicação dos dois ajustes de curva dado pela EUR e LP. Posteriormente, apresentaremos outras maneiras de como se obter o expoente de rugosidade.

Similarmente ao que foi feito para a obtenção do expoente dinâmico z (ver Seção 3.1) utilizando os dados obtidos de W_{sat} (obtidos tanto pela EUR quanto por LP) como função do tamanho L , podemos encontrar o expoente α , da seguinte forma:

$$W_{sat} = C_2 L^\alpha, \quad (3.4)$$

onde C_2 e α são encontrados por ajuste de curva.

Nas Figuras 3.4 (a) e (b) mostramos a rugosidade de saturação W_{sat} como em função do tamanho do sistema L (pontos), onde os valores de W_{sat} foram obtidos pelo ajuste de curva EUR em a) e por meio da LP em b). A linha pontilhada representa o ajuste de curva obtido pela Equação (3.4). Os valores obtidos do expoente de rugosidade α a partir dos dados estão listados na Tabela 3.3.

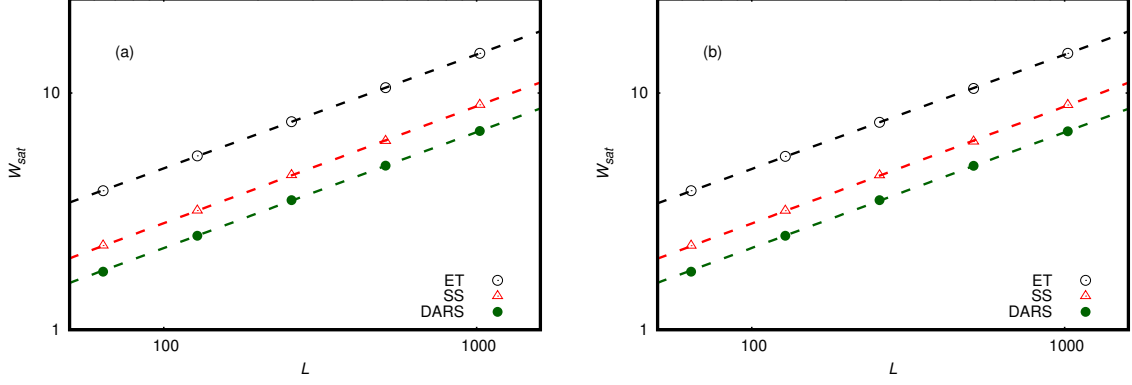


Figura 3.4: Rugosidade de saturação W_{sat} versus o tamanho do sistema L , para cada modelo, DARS, ET e SS. Em ambas as figuras temos α calculado por meio da Eq. (1.4), linhas pontilhadas, sobre os valores de W_{sat} obtidos mediante EUR em (a) e LP em (b).

Expoente dimênico	LP	EUR
α_{ET}	0,48243(2)	0,48071(7)
α_{SS}	0,49401(4)	0,49408(3)
α_{DARS}	0,48857(3)	0,48990(2)

Tabela 3.3: Valores do expoente de rugosidade α para cada modelo, obtidos por meio da aplicação dos ajustes de curva (3.4) aos dados de W_{sat} fornecidos via EUR e LP.

Diante do exposto na Tabela 3.3 notamos que não existe uma diferença significativa entre os valores de α obtidos pela EUR e LP, onde por meio do erro é possível dizer que ambos os resultados são similares. Desse modo, como não é possível determinar qual método fornece o melhor expoente de rugosidade α , propomos obter um α atribuindo o valor exato da contante C_2 na Eq. (3.4). Ao invés de ajustar dois parâmetros, ajustaremos apenas o expoente α e, dessa forma, poderemos verificar se o α obtido apresenta uma melhora significativa, vale lembrar que esse processo será feito apenas para os modelos pertencentes a classe de universalidade de KPZ, ou seja, será feito apenas para os modelos SS e ET.

Para isso, precisamos considerar as Refs. [19, 56], que demonstram uma solução

exata para o modelo SS em 1+1 dimensões,

$$W_{sat}(L) = \left(\frac{D}{24\nu} L \right)^{1/2}, \quad (3.5)$$

onde D e ν são os mesmos parâmetros existentes na equação de KPZ (1.18).

Recentemente Gomes e colaboradores [35, 53] mostraram que no limite contínuo o modelo ET torna-se a equação de KPZ (1.18). Além disso, eles obtiveram uma relação entre as constantes como:

$$D = \omega_0 d, \quad (3.6)$$

$$\nu = \frac{\omega_0 d}{2} P(0) = \frac{D}{2} P(0). \quad (3.7)$$

e

$$\lambda = 2\omega_0 d \frac{dP(\eta = 0^+)}{d\eta} = 2D[P(1) - P(0)], \quad (3.8)$$

onde o parâmetro ω é a frequência que conduz todos os processos, d a dimensão, neste caso, $d = 1$. Além disso, $P(\eta)$ é a probabilidade de existir uma diferença de altura $\eta = h_i - h_{i\pm 1}$, entre sítios i e seus primeiros vizinhos $i \pm 1$, considerando apenas valores de $\eta \geq 0$. Deste modo, para o modelo de etching a Eq. (3.5) torna-se

$$W_{sat}(L) = \left(\frac{1}{12P(0)} L \right)^{1/2}. \quad (3.9)$$

No trabalho de Gomes *et al* [35, 53] encontraram os valores para $P(0)$ em várias dimensões. Vamos considerar a constante, $C_2 = \sqrt{\frac{1}{12P(0)}}$ na Equação (3.4) como parâmetro fixo durante o ajuste.

No tocante ao modelo SS, a partir da Eq. 3.5 e chamando

$$c = \frac{A}{12}, \quad (3.10)$$

onde

$$A = \frac{D}{2\nu} \quad (3.11)$$

De acordo com a Ref. [18] para o caso unidimensional, $d = 1$, temos $A = 1$. Assim consideramos a constante, C_2 para o modelo SS como sendo $C_2 = \sqrt{\frac{1}{12}}$, uma vez que, para o modelo SS os $P(0)$ não é considerado.

A Figura 3.5 mostra o valor do expoente α encontrado mediante o valor fixo da constante C_2 para dois modelos, ET e SS.

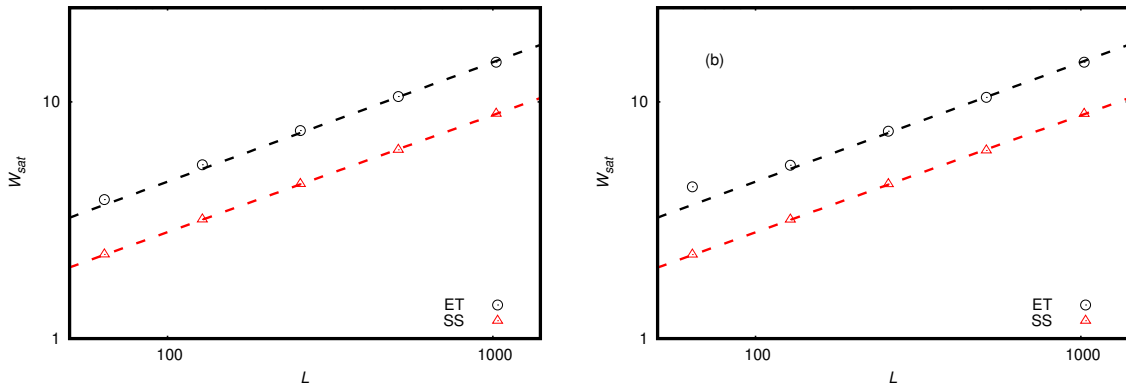


Figura 3.5: Rugosidade de saturação W_{sat} versus o tamanho do sistema L , para cada modelo. As linhas pontilhadas representam o ajuste da Eq. (3.4) com atribuição da constante C_2 , aplicados aos valores que foram encontrados por meio da EUR em (a) e LP em (b).

Ajuste	Expoente de rugosidade	C_2 ajustável	C_2 fixo
LP	α_{ET}	0,48243(2)	0,50464(3)
	α_{SS}	0,49401(4)	0,49412(4)
EUR	α_{ET}	0,48071(7)	0,50462(1)
	α_{SS}	0,49408(3)	0,49452(3)

Tabela 3.4: Valores do expoente de rugosidade α para cada modelo, obtidos por meio da aplicação do ajuste de curva à Eq. (3.4), na terceira coluna temos os valor de α com C_2 ajustável já na última coluna a constante C_2 assume um valor fixo dado na Eq. (3.9).

Na Tabela 3.4 verificamos que aplicando o valor exato da constante C_2 a função de ajuste, Eq. (3.4), os dois modelos apresentam uma melhora, o que sugere que ao

termos menos parâmetros para analisar os resultados se mostram satisfatórios, uma vez que, os erros diminuem. A seguir mostraremos como podemos obter o expoente de rugosidade α via função de correlação.

3.2.1 Obtendo α via função de correlação

A função de correlação, em geral, se refere a uma medida de correção entre duas variáveis. Neste caso, a variável em questão é a altura do sítio i , h_i , e como essa altura está relacionada com a altura do seus vizinhos, matematicamente a mesma pode ser calculada como:

$$C(r) = \langle [h_i(i+r) - h_i(i)]^2 \rangle = C(1)r^{2\alpha}, \quad (3.12)$$

onde r corresponde a uma distância do sítio i , sendo válido apenas para r pequeno $r \ll \xi$, com ξ sendo o comprimento de correlação. A constante $C(1)$ é encontrada para $r = 1$. Observe que nesta definição podemos obter α diretamente [34].

Implementamos a função de correlação, Eq. (3.12), apenas para os modelos ET e SS. No caso do modelo SS vimos que a diferença entre as alturas dos vizinhos próximos é $\eta = \pm 1$, assim a construção da relação entre essas variáveis pode ser escrito da seguinte forma:

$$S_i = h_i(i+1) - h_i(i) = \pm 1, \quad (3.13)$$

o termo S_i representa a diferença das alturas em uma superfície para o modelo SS, onde essa diferença admite apenas dois valores, ± 1 . Observe que para $r = 1$, temos:

$$\begin{aligned} C(1) &= \langle [h_i(i+1) - h_i(i)]^2 \rangle \\ &= \langle (S_i)^2 \rangle \\ &= 1. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Para cada instante de tempo t , calculamos $C(r)$ variando r ao longo dos primeiros

vizinhos. No caso do ET os 8 vizinhos mais próximos foram considerados enquanto que para o modelo *SS* apenas 3 vizinhos. Ao ajustarmos cada $C(r) \propto r^{2\alpha}$, encontramos o expoente α para cada instante de tempo t . Por exemplo, mostramos na Figura 3.6 o expoente α versus t com $L = 1024$ para o modelo *SS*. Observe que α satura em um valor próximo ao valor exato, neste sentido, obtemos um expoente médio, $\bar{\alpha}$, sendo representado por uma linha contínua, $\bar{\alpha} = 0.49876(1)$.

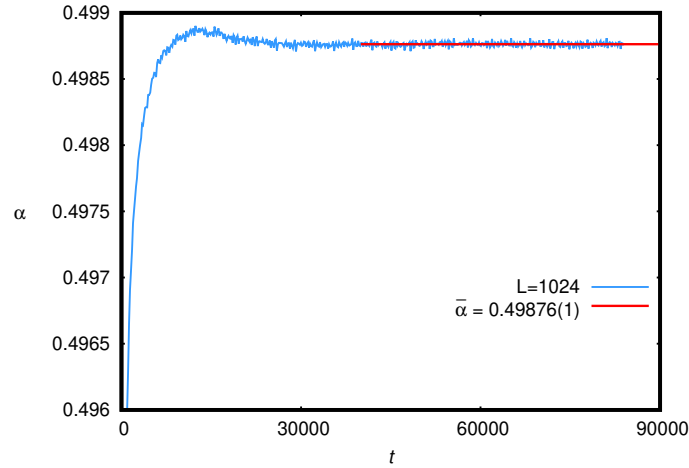


Figura 3.6: Valores de α como em função tempo t para o modelos *SS*, obtidos via função de correlação, Eq. (3.12). A linha contínua em vermelho refere-se a média obtida no intervalo de tempo $4 \times 10^4 < t < 9 \times 10^4$, isto é, $\bar{\alpha} = 0.49876(1)$.

Na Figura 3.7 mostramos o $\bar{\alpha}$ como função do tamanho L , obtidos para os modelos ET e *SS* (pontos). Notamos que conforme aumentamos o tamanho do sistema, ou seja, quando $L \rightarrow \infty$, temos a evidência de uma correspondência onde $\bar{\alpha} \rightarrow 1/2$. Isso mostra que há uma dependência dos valores do expoente com relação a L , indicando que possa existir efeitos de dimensão finita nesse expoente. Para eliminar os efeitos de dimensão finita propomos um ajuste de curva da seguinte forma:

$$\alpha(L) = \alpha + \frac{C_3}{L}. \quad (3.15)$$

Ao fazermos o uso da Eq. (3.15) obtemos a Figura 3.7, onde os pontos representam as simulações para os modelos ET e *SS* em (1+1) dimensões, as linhas tracejadas evidenciam o ajuste de curva dado pela Eq. (3.15) e logo a baixo temos a Tabela (3.5) com os valores obtidos de $\bar{\alpha}$ para cada modelo.

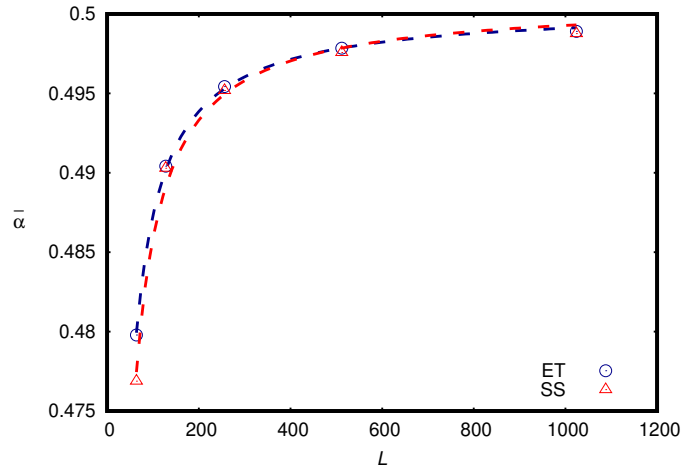


Figura 3.7: Valores de α como em função de diferentes tamanhos do substrato L para os modelos ET e SS. As linhas pontilhadas representam o ajuste de curva, Eq. (3.15), usada de forma que possa eliminar os efeitos de dimensão finita.

Modelos	α via função de correlação
ET	0.5004(2)
SS	0.5007(6)

Tabela 3.5: Valores do expoente de rugosidade α calculados por meio da função de correlação, Eq. (3.12).

Observando os valores mostrados na Tabela 3.5 fica evidente que é possível encontrarmos expoente de rugosidade α excelentes quando obtido a partir da função de correlação (3.12). Pois os parâmetros a serem encontrados diminuem fazendo com que as medidas obtidas sejam mais precisas. Sabemos que ET e SS são modelos pertencentes a classe de universalidade de KPZ [13, 16, 18, 19], onde para KPZ-unidimensional o valor de $\alpha = 1/2$ [9, 33], logo os valores encontrados de α para ambos os modelos são excelentes.

Capítulo 4

Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação apresentamos conceitos essenciais da nossa pesquisa quanto ao crescimento de superfícies rugosas em redes unidimensionais, as discussões sobre esse tema é importante devido a grande soma de fenômenos naturais que podem ser modelados desta forma, pois esse tipo de crescimento/deposição abrange diversas áreas de conhecimento.

Para a realização deste trabalho fizemos a abordagem de alguns modelos de crescimento/deposição de partículas simples, sendo esses: Deposição Aleatória com Relaxação Superficial, Modelo de Etching e Single-Step em redes unidimensionais. Encontramos que esses modelos pertencem as duas classes de universalidades aqui revisadas como: EW e KPZ. Utilizamos autômatos celulares com um conjunto de regras simples para simular esses modelos assim como condições de contorno periódicas a fim de evitarmos efeitos de tamanho finito. O foco desse trabalho diz respeito a obtenção do expoente de rugosidade α e a fim de encontrá-lo utilizamos métodos distintos de análise.

Posteriormente apresentamos os resultados onde mostramos os métodos utilizados para a obtenção do expoente de rugosidade para os três modelos estudados. Seguindo ainda nessa etapa verificou-se que os resultados dos expoentes de crescimento obtidos estavam em acordo com publicações atuais. Com os dados encontrados, foi possível fazer um mapeamento das principais classes de universalidade encontradas na literatura o que confirmou que o modelos estudados pertencem as classes EW e

KPZ.

Em seguida, ao observar somente o expoente de rugosidade que foram fornecidos a partir dos diferentes métodos aqui citados como: 1) Funções de ajuste: Lei de potências e Equação Universal da Rugosidade; 2) via valor exato da constante (C_2) que está inserida na Eq.(3.5), nesse método usamos a solução exata $W_{sat}(L) = \left(\frac{D}{24\nu}L\right)^{1/2}$ proposta por Krug [19, 56] para o modelo SS em (1+1) dimensões, onde consideramos o coeficiente fixo e ajustamos apenas o expoente α . Para isso também utilizamos o trabalho recente de Gomes [35], que fez relação com o modelo de corrosão e atribuiu um significado físico aos parâmetros de KPZ. Esse procedimento só é feito para modelos da classe de universalidade KPZ e por último temos o método 3) função de correlação.

Constatou-se que a maioria dos valores de α encontrados foram satisfatórios, sendo eles, os obtidos por meio da EUR, Eq. (3.1), e ao se fixar o valor da constante (C_2) também obtivemos um valor considerável desse expoente. Contudo, o método 3) oferece um valor do expoente de rugosidade muito próximo do valor exato para os modelos dentro da classe de universalidade KPZ. Assim, é possível afirmar que uma função de correlação associada a um modelo de crescimento/deposição de partículas em interfaces rugosas pode oferecer valores de expoentes de crescimento satisfatórios.

Tem-se como perspectiva futura a este trabalho avançar nos estudos de crescimento de superfícies para redes bidimensionais. Outra questão relevante a do Teorema de flutuação dissipação (TFD) para $d+1$ dimensões.

Temos em [44] que para $d > 1$, há uma violação do TFD para a Equação de KPZ [33, 57], onde a abordagem do grupo de renormalização funciona para $1 + 1$ dimensões, mas falha para $d + 1$, quando $d > 1$. A violação do TFD é conhecido na literatura, em vidro estrutural [58, 59, 60], em proteínas [61], transferência de calor em escala mesoscópica [62], e também em difusão balística [55, 63, 64, 65, 66, 67]. Portanto, o lugar para procurar uma solução para os expoentes de KPZ é a partir do TFD para $d + 1$ dimensões [34, 44, 45].

Deste modo será extremamente produtivo continuar nessa direção.

Apêndice A

Ajustes

Neste apêndice, mostramos os ajustes de curvas já mencionados no capítulo 3 e posteriormente encontramos os parâmetros de crescimento, W_{sat} , t_{sat} e β obtidos para cada tamanho de substrato L dos três modelos estudados, DARS, ET e SS, todos em $1 + 1$ dimensões. Em seguida mostramos o expoente de crescimento β como função de L .

A.1 Dados dos ajustes de curva

Nas figuras A.1, A.2 e A.3, temos os dados obtidos das simulações. As simulações foram realizadas com $L = 2^n$, com $n = 6, 7, 8, 9$ e 10 . Como já mencionado o n (número de experimentos) são todos iguais para o modelo DARS, apenas para os modelos ET e SS o n diminui a medida que o valor do substrato L aumenta.

Todas as figuras A.1, A.2 e A.3 são plotadas com a rugosidade, $W(t)$, em função do tempo t em escala log-log. Em (a), (c), (e) são ajustadas com a função (3.1), já em (b), (d) e (f) elas são ajustadas via lei de potência. Os pontos representam as médias das simulações e os ajustes são representados pelas linhas pontilhadas, já as linhas pretas na vertical indicam o momento onde as duas retas (pontilhadas) se encontram e marca o valor medido de t_{sat} .

É possível observar nas figuras a relação entre o tempo de saturação t_{sat} e o tamanho do substrato L pois, é evidente que para $t < t_{sat}$ o gráfico se estabiliza

conforme aumentamos o tamanho do sistema.

Modelo DARS

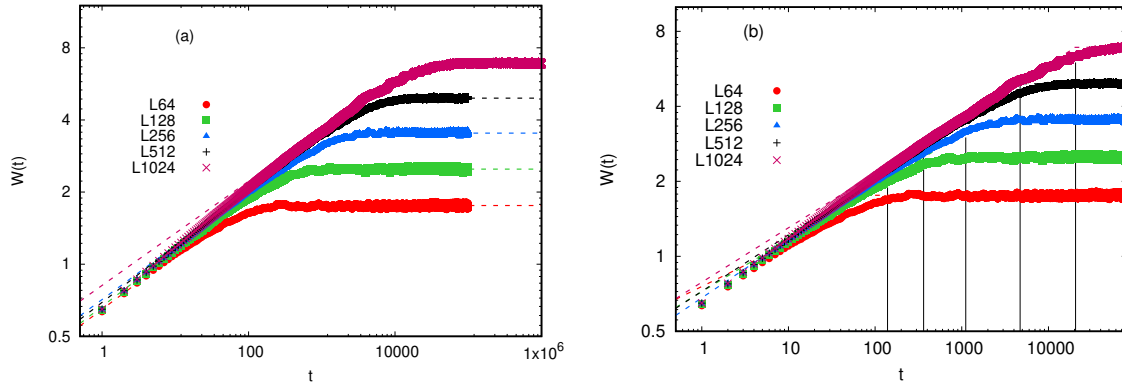


Figura A.1: Rugosidade $W(t)$ como em função do tempo t , para diferentes tamanhos do substrato L obtidos para o modelo DARS onde em (a) temos o ajuste de curva dado pela EUR e em (b) o ajuste via lei de potência.

Modelo ET

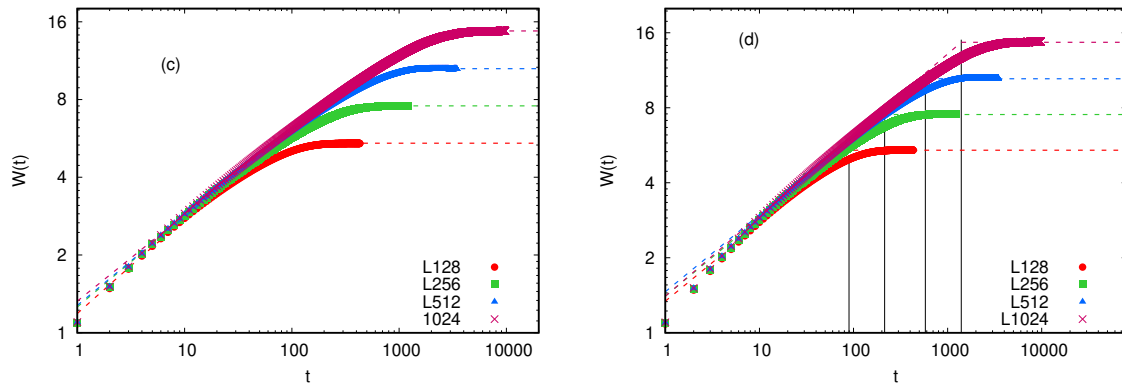


Figura A.2: Rugosidade $W(t)$ em função do tempo t , para vários tamanhos de L , obtidos para o modelo ET a partir dos ajustes de curva EUR em (c) e pelas leis de potência em (d).

Modelo SS

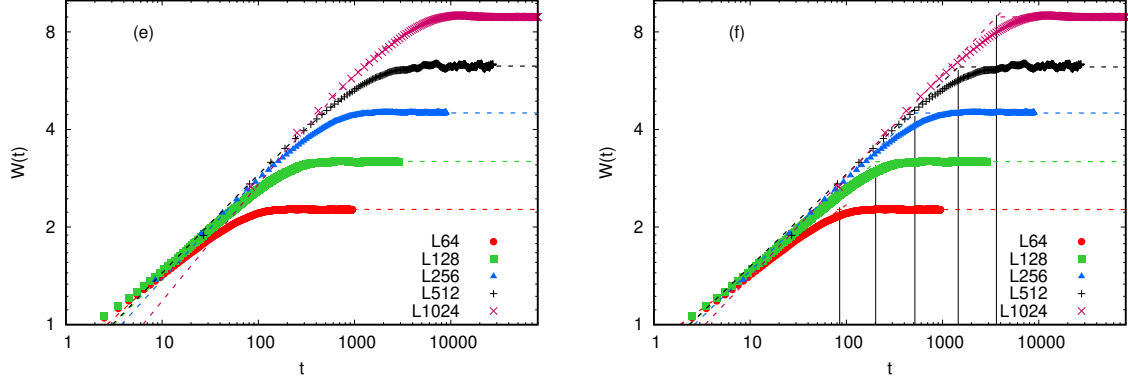


Figura A.3: Rugosidade $W(t)$ versus o tempo t com variação do tamanho do sistema L , calculados com os devidos ajustes de curva para o modelo SS por meio da EUR em (e) e das leis de potência em (b).

A.2 Expoente de Crescimento

De forma semelhante ao que foi feito para os valores de α e z quando aplicado o ajuste via Lei de potência, ver capítulo 3, podemos obter o expoente β ajustando nossos dados a relação de Family-Vicsek, onde para valores de $t < t_{sat}$, temos $W(L, t) \sim t^\beta$, eq.(1.3), observado no capítulo 1.

Contudo, diferentemente do ajuste de α , os valores de β podem ser obtidos de maneira direta a partir da eq.(3.1), tornando a sua obtenção mais rápida e diminuindo a propagação de erros. Assim, na figura A.4 apresentamos as curvas com os valores de β obtidos para os modelos estudados obtidos por meio da EUR eq. (3.1) em (a) e via lei de potência eq. (1.3) em (b).

A equação (A.1) foi proposta para encontrar o expoente β , ela é de tal forma que considera-se uma maneira de eliminar os efeitos de dimensão finita, assim temos:

$$\beta(L) = \beta + \frac{c}{L}, \quad (\text{A.1})$$

ou seja, se consideramos que $L \rightarrow \infty$ então $\beta(L)$ converge para β , c é uma constante ajustável.

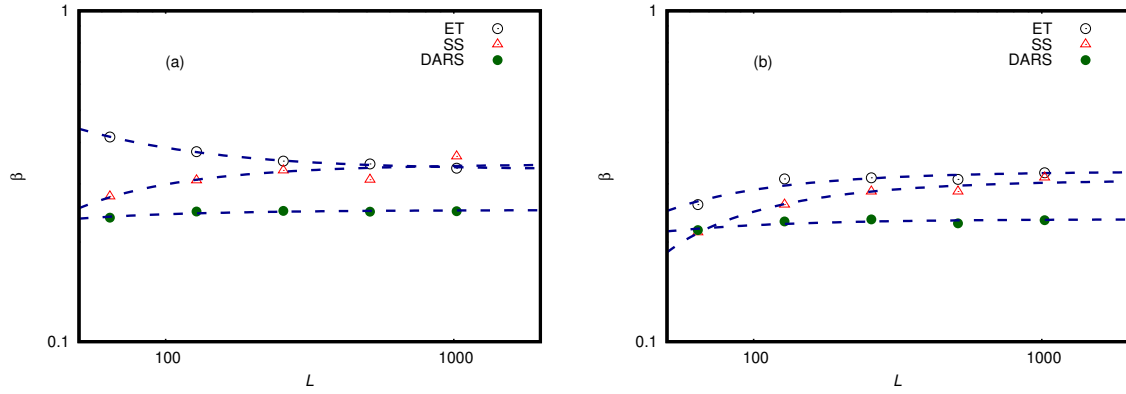


Figura A.4: Expoente de crescimento β versus o comprimento do substrato L , ajustado com a EUR em (a) e via lei de potência em (b). É perceptível que quando $L\beta_\infty$ então β_L converge para o valor esperado de β .

A tabela A.1 mostra os valores de beta para cada modelo obtidos a partir da aplicação dos dois ajustes de curva.

Expoente dinâmico	LP	EUR
β_{ET}	0.326(7)	0.331(2)
β_{SS}	0.308(6)	0.34(1)
β_{DARS}	0.234(3)	0.249(2)

Tabela A.1: Valores de β para os modelos ET, SS e DARS obtidos pelos ajustes Leis de potência e EUR.

Desse modo, podemos dizer que o ajuste de curva dado pela EUR fornece melhores expoentes, especialmente para o modelo ET que apresentou um excelente valor.

Referências Bibliográficas

- [1] BEN-JACOB, E.; SHOCHET, O.; TENENBAUM, A.; COHEN, I.; CZIRÓK, A.; VICSEK, T. Communication, regulation and control during complex patterning of bacterial colonies. *Fractals*, v. 02, n. 01, p. 15–44, 1994.
- [2] da Cunha, J.; PENNA, A.; VAINSTEIN, M.; MORGADO, R.; OLIVEIRA, F. Self-organization analysis for a nonlocal convective fisher equation. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 373, n. 6, p. 661–667, 2009.
- [3] DA CUNHA, J. A. R.; PENNA, A. L. A.; OLIVEIRA, F. A. Pattern formation and coexistence domains for a nonlocal population dynamics. *Phys. Rev. E*, v. 83, p. 015201, Jan 2011.
- [4] Tumbarell Aranda, O.; PENNA, A. L.; OLIVEIRA, F. A. Nonlinear self-organized population dynamics induced by external selective nonlocal processes. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, v. 93, p. 105512, 2021.
- [5] BARBOSA, F. V.; PENNA, A. A.; FERREIRA, R. M.; NOVAIS, K. L.; da Cunha, J. A.; OLIVEIRA, F. A. Pattern transitions and complexity for a nonlocal logistic map. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 473, p. 301–312, 2017.
- [6] OJEDA, F.; CUERNO, R.; SALVAREZZA, R.; VÁZQUEZ, L. Dynamics of rough interfaces in chemical vapor deposition: Experiments and model for silica films. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 84, p. 3125, 01 2000.

- [7] ALMEIDA, R. A. L.; FERREIRA, S. O.; OLIVEIRA, T. J.; REIS, F. D. A. A. Universal fluctuations in the growth of semiconductor thin films. *Phys. Rev. B*, v. 89, p. 045309, Jan 2014.
- [8] MEAKIN, P.; RAMANLAL, P.; SANDER, L. M.; BALL, R. C. Ballistic deposition on surfaces. *Phys. Rev. A*, v. 34, p. 5091–5103, Dec 1986.
- [9] BARABÁSI, A.-L.; STANLEY, H. E. *Fractal concepts in surface growth* /. First edition. ed. New York :: Press Syndicate of the University of Cambridge,, 1995. Include alphabetical index.
- [10] KWAK, W.; KIM, J. M. Random deposition model with surface relaxation in higher dimensions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 520, p. 87–92, 2019.
- [11] OLIVEIRA-FILHO, J. S. *Modelos competitivos de deposição de partículas*. 2012. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Viçosa Curso de Pós-Graduação em Física, Minas Gerais, 2012.
- [12] FORGERINI, F. L. *Dinâmica de superfície na deposição de partículas de diferentes tamanhos*. 2008. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Santa Catarina Curso de Pós-Graduação em Física, Florianópolis, 2008.
- [13] MELLO, B. A.; CHAVES, A. S.; OLIVEIRA, F. A. Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, v. 63, p. 041113, 05 2001.
- [14] RODRIGUES, E. A.; MELLO, B. A.; OLIVEIRA, F. A. Growth exponents of the etching model in high dimensions. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 48, n. 3, p. 035001, dec 2014.
- [15] MYLLYS, M.; MAUNUKSELA, J.; ALAVA, M.; ALA-NISSILA, T.; MERIKOSKI, J.; TIMONEN, J. Kinetic roughening in slow combustion of paper. *Phys. Rev. E*, v. 64, p. 036101, Aug 2001.

- [16] RODRIGUES, E. A. *Correlação de velocidade em um modelo de corrosão*. 2008. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de Brasília Curso de Pós-Graduação em Física, Brasília, 2008.
- [17] RODRIGUES, E. A. *Dinâmica de corrosão: Expoentes críticos, invariância de galileu e dimensão superior*. 2013. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Brasília Curso de Pós-Graduação em Física, Brasília, 2013.
- [18] DARYAEI, E. Universality and crossover behavior of single-step growth models in $1 + 1$ and $2 + 1$ dimensions. *Phys. Rev. E*, v. 101, p. 062108, Jun 2020.
- [19] KRUG, J.; MEAKIN, P.; HALPIN-HEALY, T. Amplitude universality for driven interfaces and directed polymers in random media. *Phys. Rev. A*, v. 45, p. 638–653, Jan 1992.
- [20] FARIA, A. A. P. *Aspectos fractais em sistemas complexos*. 2002. Tese (Doutorado em Física) - Universidade federal de Minas Gerais Curso de Pós-Graduação em Física, Minas Gerais, 2002.
- [21] SALVAREZZA, R.; VÁZQUEZ, L.; MÍGUEZ, H.; MAYORAL, R.; LOPEZ, C.; MESEGUER, F. Edward-wilkinson behavior of crystal surfaces grown by sedimentation of SiO_2 nanospheres. *Physical review letters*, v. 77, p. 4572–4575, 12 1996.
- [22] PRUESSNER, G.; JENSEN, H. J. Anisotropy and universality: The oslo model, the rice pile experiment, and the quenched edwards-wilkinson equation. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, p. 244303, Dec 2003.
- [23] MAUNUKSELA, J.; MYLLYS, M.; KÄHKÖNEN, O.-P.; TIMONEN, J.; PROVATAS, N.; ALAVA, M. J.; ALA-NISSILA, T. Kinetic roughening in slow combustion of paper. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, p. 1515–1518, Aug 1997.
- [24] MYLLYS, M.; MERIKOSKI, J.; TIMONEN, J. Experimental determination of kpz height-fluctuation distributions. *The European Physical Journal B*, Les Ulis, v. 46, p. 55–60, 07 2005.

- [25] SQUIZZATO, D.; CANET, L.; MINGUZZI, A. Kardar-parisi-zhang universality in the phase distributions of one-dimensional exciton-polaritons. *Phys. Rev. B*, v. 97, p. 195453, May 2018.
- [26] MATTOS, T. G. *Autômatos celulares e crescimento de interfaces rugosas*. 2005. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais Curso de Pós-Graduação em Física, Brasília, 2005.
- [27] ALMEIDA, D. *Classes de universalidade na equação de edwards-wilkinson com memória*. 2014. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de Brasília- Faculdade de Planaltina Curso de Pós-Graduação em Física, Brasília, 2014.
- [28] WOLFRAM, S. Statistical mechanics of cellular automata. *Rev. Mod. Phys.*, v. 55, p. 601–644, Jul 1983.
- [29] ALVES, W. S. *Metodologia analítica para o modelo de corrosão: Crescimento e rugosidade*. 2014. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de Brasília- Faculdade de Planaltina Curso de Pós-Graduação em Física, Brasília, 2014.
- [30] FAMILY, F.; VICSEK, T. Dynamics of fractal surfaces. 1991.
- [31] FAMILY, F.; VICSEK, T. Scaling of the active zone in the eden process on percolation networks and the ballistic deposition model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 18, n. 2, p. L75–L81, feb 1985.
- [32] Edwards, S. F.; Wilkinson, D. R. The Surface Statistics of a Granular Aggregate. *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, v. 381, n. 1780, p. 17–31, May 1982.
- [33] KARDAR, M.; PARISI, G.; ZHANG, Y.-C. Dynamic scaling of growing interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, v. 56, p. 889–892, Mar 1986.

- [34] GOMES-FILHO, M. S.; PENNA, A. L.; OLIVEIRA, F. A. The kardar-parisi-zhang exponents for the 2+1 dimensions. *Results in Physics*, v. 26, p. 104435, 2021.
- [35] GOMES, W. P.; PENNA, A. L. A.; OLIVEIRA, F. A. From cellular automata to growth dynamics: The kardar-parisi-zhang universality class. *Phys. Rev. E*, v. 100, p. 020101, Aug 2019.
- [36] CARRASCO, I. S. S.; OLIVEIRA, T. J. Kardar-parisi-zhang growth on one-dimensional decreasing substrates. *Phys. Rev. E*, v. 98, p. 010102, Jul 2018.
- [37] LEE, D.-S.; KIM, D. Universal fluctuation of the average height in the early-time regime of one-dimensional kardar-parisi-zhang-type growth. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2006, p. 11, 05 2006.
- [38] SASAMOTO, T.; SPOHN, H. One-dimensional kardar-parisi-zhang equation: An exact solution and its universality. *Physical review letters*, v. 104, p. 230602, 06 2010.
- [39] QUASTEL, J.; SPOHN, H. The one-dimensional kpz equation and its universality class. *Journal of Statistical Physics*, New York, v. 160, 03 2015.
- [40] FERREIRA, M. *Estudo da propagação de interfaces rugosas*. 2018. Tese (Doutorado em Física) - Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais Curso de Pós-Graduação em Física, Belo Horizonte, 2018.
- [41] DASHTI-NASERABADI, H.; SABERI, A. A.; ROUHANI, S. Roughening transition and universality of single step growth models in (2+1)-dimensions. *New Journal of Physics*, v. 19, n. 6, p. 063035, Jun 2017.
- [42] KISSINGER, T.; KOTOWICZ, A.; KURZ, O.; GINELLI, F.; HINRICHSSEN, H. Nonequilibrium wetting of finite samples. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2005, p. 06002, 2005.

- [43] ALMEIDA, R.; FERREIRA, S.; FERRAZ, I.; OLIVEIRA, T. Initial pseudo-steady state e asymptotic kpz universality in semiconductor on polymer deposition. *Scientific Reports*, v. 7, 06 2017.
- [44] dos Anjos, P. H. R.; Gomes-Filho, M. S.; Alves, W. S.; Azevedo, D. L.; Oliveira, F. A. The fractal geometry of growth: Fluctuation–dissipation theorem and hidden symmetry. *Frontiers in Physics*, v. 9, p. 566, 2021.
- [45] GOMES-FILHO, M. S.; OLIVEIRA, F. A. The hidden fluctuation-dissipation theorem for growth (a). *EPL (Europhysics Letters)*, v. 133, n. 1, p. 10001, jan 2021.
- [46] MORAES, A. L. S. *Um estudo sobre a aplicação de autômatos celulares na simulação de fenômenos ambientais e aspectos dinâmicos*. 2007. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Católica de Pelotas Curso de Pós-Graduação em Física, Rio Grande do Sul, 2007.
- [47] ALVES, W. S.; RODRIGUES, E. A.; FERNANDES, H. A.; MELLO, B. A.; OLIVEIRA, F. A.; COSTA, I. V. L. Analysis of etching at a solid-solid interface. *Phys. Rev. E*, v. 94, p. 042119, Oct 2016.
- [48] CARRASCO, I. S. S. *Efeitos das condições iniciais na dinâmica de crescimento de interfaces*. 2018. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Viçosa Curso de Pós-Graduação em Física, Minas Gerais, 2018.
- [49] FAMILY, F. Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 19, n. 8, p. L441–L446, jun 1986.
- [50] BUCETA, R. C.; HANSMANN, D.; VON HAEFTEN, B. Revisiting random deposition with surface relaxation: approaches from growth rules to the edwards-wilkinson equation. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2014, n. 12, p. P12028, dec 2014.

- [51] MELLO, B. A. A random rule model of surface growth. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 419, p. 762–767, 2015.
- [52] REIS, F. D. A. A. Numerical study of roughness distributions in nonlinear models of interface growth. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 032601, Sep 2005.
- [53] GOMES, W. P. *Comportamento particular e universal para a dinâmica de crescimento: De autômatos celulares à equação kardar-parisi-zhang (kpz)*. 2020. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Brasília Curso de Pós-Graduação em Física, Brasília, 2020.
- [54] WILLIAMS, T.; KELLEY, C.; many others. Gnuplot 4.6: an interactive plotting program. <http://gnuplot.sourceforge.net/>, April 2013.
- [55] COSTA, I. V. L. *Processos estocásticos: difusão e crescimento*. 2006. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Brasília Curso de Pós-Graduação em Física, Brasília, 2006.
- [56] KRUG, J. Origins of scale invariance in growth processes. *Advances in Physics*, London, v. 46, n. 2, p. 139–282, 1997.
- [57] RODRÍGUEZ, M. A.; WIO, H. S. Stochastic entropies and fluctuation theorems for a discrete one-dimensional kardar-parisi-zhang system. *Phys. Rev. E*, v. 100, p. 032111, Sep 2019.
- [58] GRIGERA, T. S.; ISRAELOFF, N. E. Observation of fluctuation-dissipation-theorem violations in a structural glass. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 83, p. 5038–5041, 1999.
- [59] BARRAT, A. Monte carlo simulations of the violation of the fluctuation-dissipation theorem in domain growth processes. *Phys. Rev. E*, v. 57, p. 3629–3632, Mar 1998.
- [60] BELLON, L.; CILIBERTO, S. Experimental study of the fluctuation dissipation relation during an aging process. *Physica D: Nonlinear Phenomena*,

v. 168-169, p. 325–335, 2002. VII Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena.

- [61] HAYASHI, K.; TAKANO, M. Violation of the fluctuation-dissipation theorem in a protein system. *Biophysical journal*, v. 93 3, p. 895–901, 2007.
- [62] PEREZ-MADRID, A.; LAPAS, L.; RUBI, J. Heat exchange between two interacting nanoparticles beyond the fluctuation-dissipation regime. *Physical review letters*, v. 103, p. 048301, 08 2009.
- [63] COSTA, I.; MORGADO, R.; LIMA, M.; OLIVEIRA, F. The fluctuation-dissipation theorem fails for fast superdiffusion. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 63, p. 173, 01 2007.
- [64] LAPAS, L.; COSTA, I.; VAINSTEIN, M.; OLIVEIRA, F. Entropy, non-ergodicity and non-gaussian behaviour in ballistic transport. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 77, n. 3, p. 37004, 2007.
- [65] LAPAS, L.; MORGADO, R.; VAINSTEIN, M.; RUBI, J.; OLIVEIRA, F. Khinchin theorem and anomalous diffusion. *Physical review letters*, v. 101, p. 230602, 01 2009.
- [66] VAINSTEIN, M.; COSTA, I.; OLIVEIRA, F. *Mixing, ergodicity and the fluctuation-dissipation theorem in complex systems*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006. p. 159–188.
- [67] COSTA, I.; VAINSTEIN, M.; LAPAS, L.; BATISTA, A.; OLIVEIRA, F. Mixing, ergodicity and slow relaxation phenomena. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 371, n. 1, p. 130–134, 2006. LAWNP 2005.