

DINÂMICA DE CRESCIMENTO DE INTERFACE: RELAÇÃO ENTRE A
GEOMETRIA FRACTAL DA SUPERFÍCIE E OS EXPOENTES DA
EQUAÇÃO DE KARDAR-PARISI-ZHANG

Washington Soares Alves

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

Orientador: Fernando Albuquerque de Oliveira

Coorientador: Márcio Sampaio Gomes Filho

Brasília

Novembro de 2022

Soares Alves, Washington

Dinâmica de crescimento de interface: relação entre a geometria fractal da superfície e os expoentes da equação de Kardar-Parisi-Zhang/Washington Soares Alves. – Brasília: IF/UnB, 2022.

XII, 73 p.: il.; 29,7cm.

Orientador: Fernando Albuquerque de Oliveira

Tese (doutorado) – Instituto de Física/UnB, 2022.

Referências Bibliográficas: p. 54 – 73.

1. Equação de Kardar-Parisi-Zhang. 2. Expoentes de crescimento. 3. Dimensão fractal. 4. Modelo Single-Step. I. Oliveira, Fernando Albuquerque de. II. Universidade de Brasília, Instituto de Física. III. Título.

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a DEUS, pela coragem, força e perseverança que me tem dado no decorrer dessa jornada.

Aos meus Pais, Sebastião e Luzia, aquele sempre me fortalecendo com suas palavras de esperança e incentivo e esta que, embora não esteja mais entre nós, fez me sentir a sua presença nos momentos mais difíceis, o que me confortou bastante.

À esposa, Socorro, e filhos, Marcos Wesley e Wanderson, aos quais deixei muitas vezes de oferecer atenção necessária.

Agradecimento especial ao Professor e orientador Fernando Albuquerque de Oliveira e ao coorientador, Dr. Márcio Sampaio Gomes Filho, pela paciência, perseverança e incentivo, que, com maestria e determinação, incentivou-me em momentos bastantes difíceis no decorrer dessa caminhada. Meu muito obrigado.

Destaco, aqui, o meu agradecimento aos professores membros da banca, David Lima Azevedo, Fernando Barbosa Vito da Silva e Luciano C. Lapas pelas grandes correções/sugestões que engrandeceram este trabalho/estudo, o que permitiu uma apresentação final mais significativa. Obrigado!

Agradeço ainda aos amigos que fiz no Instituto de Física da Unb, Renato, Waldenor, Rendisley, Gláucia. Agradeço a toda a equipe da secretaria da Pós-Graduação em Física, pelos muitos auxílios prestados.

Agradeço a Secretaria de Educação do Distrito Federal que me concedeu afastamento para a realização de meus estudos.

Agradeço também a prof. Ieda Macêdo pelas prestimosas correções desse trabalho.

Resumo da Tese apresentada ao IF/UnB como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

DINÂMICA DE CRESCIMENTO DE INTERFACE: RELAÇÃO ENTRE A
GEOMETRIA FRACTAL DA SUPERFÍCIE E OS EXPOENTES DA
EQUAÇÃO DE KARDAR-PARISI-ZHANG

Washington Soares Alves

Novembro/2022

Orientador: Fernando Albuquerque de Oliveira

Coorientador: Márcio Sampaio Gomes Filho

Fenômenos de crescimento são observados em situações diversas, tais como crescimentos de filmes finos, colônia de bactérias, tumores, entre outros. Portanto, o seu estudo é de extrema importância tanto do ponto de vista teórico como experimental. Neste trabalho, apresentamos os conceitos básicos utilizados no estudo dos fenômenos de crescimento, seguido das equações de crescimento, como as equações de Edwards-Wilkinson (EW) e de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ), em conjunto com seus expoentes, o que determina as suas respectivas classes de universalidade. Apresentamos, em seguida, um resumo sobre a equação de Langevin e o teorema de flutuação-dissipação, seguida da definição de autômatos celulares e sua aplicação em modelos de crescimento de deposição aleatória, deposição balística, etching e single-step. No trabalho recente de Gomes-Filho e colaboradores [Result in Physics, 104.435(2021)], os autores associaram a dimensão fractal da interface com os expoentes de crescimento para KPZ, apresentando valores explícitos para eles. Neste trabalho, investigamos o teorema de flutuação-dissipação para a equação de KPZ através de simulação computacional do modelo single-step. Nossos resultados mostraram que a intensidade do ruído aplicado é alterada na medida em que a rugosidade da interface evolui no tempo, tendendo a um valor constante no regime estacionário (ruído efetivo), sendo o mesmo associado à dimensão fractal da interface. Desse modo, nossos resultados corroboram com a teoria proposta por Gomes-Filho e colaboradores.

Palavras-Chave: Equação de Kardar-Parisi-Zhang, Expoentes de crescimento, Dimensão fractal, Modelo Single-Step.

Abstract of Thesis presented to IF/UnB as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor in Physics.

INTERFACE GROWTH DYNAMICS: RELATION BETWEEN THE FRACTAL
GEOMETRY OF THE SURFACE AND THE EXPONENTS OF THE
KARDAR-PARISI-ZHANG EQUATION

Washington Soares Alves

November/2022

Orientador: Fernando Albuquerque de Oliveira

Coorientador: Márcio Sampaio Gomes Filho

Growth phenomena are observed in various situations, such as thin film growths, bacteria colony, tumors, among others. Therefore, its study is extremely important both from a theoretical and experimental point of view. In this work, we present the basic concepts used in the study of growth phenomena, followed by growth equations, such as the Edwards-Wilkinson (EW) and Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) equations, together with their exponents, which determines their respective classes of universality. We then present a summary of Langevin's equation and the fluctuation-dissipation theorem, followed by the definition of cellular automata and their application in growth models of random deposition, ballistic deposition, etching and single-step. In the recent work of Gomes-Filho and collaborators [Result in Physics, 104.435(2021)], the authors associated the fractal dimension of the interface with the growth exponents for KPZ, presenting explicit values for them. In this work, we investigate the fluctuation-dissipation theorem for the KPZ equation through computational simulation of the single-step model. Our results showed that the intensity of the applied noise is changed as the roughness of the interface evolves over time, tending to a constant value in the stationary regime (effective noise), being the same associated with the fractal dimension of the interface. Thus, our results corroborate the theory proposed by Gomes-Filho et al.

Keywords: Kardar-Parisi-Zhang Equation, Growth Exponents, Fractal Dimension, Single-Step Model.

Sumário

Lista de Figuras	viii
Lista de Símbolos	xi
Lista de Abreviaturas	xii
1 Introdução	1
1.1 Crescimento de interfaces rugosas	5
1.2 Objetivo Geral	8
1.2.1 Objetivos Específicos	8
1.3 Organização da Tese	9
2 Modelando equações de crescimento	11
2.1 Processos Estocásticos	11
2.2 Equação de Langevin	12
2.3 Modelando equações de crescimento	14
2.4 Deposição Aleatória	15
2.5 Princípios de simetria	16
2.6 Equação de Edwards-Wilkinson (EW)	18
2.6.1 Os expoentes da equação de Edwards-Wilkinson	19
2.6.1.1 Método de ajuste de escala	19
2.6.1.2 Método da transformada de Fourier	23
2.7 Equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ)	26
2.7.1 Expoentes de KPZ para $d = 1$	28

3	Autômatos celulares e modelos de crescimento	31
3.1	Modelos de Crescimento	33
3.1.1	Deposição Aleatória (DA)	33
3.1.2	Deposição Balística (DB)	34
3.1.3	Modelo de <i>Etching</i>	36
3.1.4	Modelo <i>Single-Step</i> (SS)	38
4	Resultados	42
4.1	Relação geometria fractal e TFD	44
4.2	Expoentes de KPZ para $d > 1$	48
5	Conclusões	52
	Referências Bibliográficas	54

Lista de Figuras

1.1	Exemplos de crescimento: (a) filme fino, (b) colônia de células tumorais, (c) depósito formado pelo acúmulo de flocos de neve no para-brisa de um carro e (d) queimada de uma floresta.	1
1.2	Representação do crescimento superficial (cinza), a curva em destaque (preto) representa a interface que separa os meios A e B, a altura da superfície no ponto x e no instante t , é representado por $h(x, t)$ e L corresponde ao tamanho lateral do substrato/domínio.	2
1.3	(a) Representação ilustrativa da deposição de cristais de neve em uma vidraça, possibilitando a determinação da variação entre duas alturas distintas, h_1 e h_2 . Em (b) é representado um processo de crescimento discretizado (modelagem discreta do fenômeno), com a altura h em função do tamanho do substrato L , em uma direção x . A linha horizontal - \bar{h} , representa a altura média em um instante de tempo t	3
1.4	Evolução da rugosidade, $w(L, t)$ em função do tempo em escala $\log \times \log$. Resultados referentes a diferentes modelos de crescimento em $(2 + 1)$ dimensões: (a) modelo de <i>Family</i> , (b) modelo de <i>Etching</i> , (c) e (d) modelo SS com $p = 1$ e $p = 0.05$ respectivamente.	6
1.5	Esquema representativo dos passos envolvidos no reescalonamento da rugosidade em função do tempo.	7

2.1	Esquema representativo da atuação da tensão superficial sobre uma interface de crescimento. A linha paralela ao eixo x, representa a altura média do sistema, as setas (em detalhes) representam a atuação do laplaciano, que força a suavização da interface.	19
2.2	Origem do termo não linear na equação de KPZ, que apresenta o crescimento na direção normal em cada ponto.	27
3.1	Esquema representativo do modelo de DA. Em a) é vista a aplicação da regra 1), a escolha aleatória dos sítios, e em b) a aplicação da regra 2). As partículas não interagem com os sítios vizinhos.	34
3.2	Esquema representativo do modelo DB com algumas deposições já realizadas. a) apresentação com aplicação da regra 1) escolha aleatória dos sítios onde as partículas deverão ser depositadas, A e B, aplicação da regra 1). Em b) são apresentadas as novas alturas descritas a partir da regra 2).	35
3.3	Representação ilustrativa do modelo de <i>Etching</i> em (1 + 1) dimensão. Figura a) representação do modelo com algumas configurações estabelecidas. Figuras b) e c) representando o modelo com implementação das regras 1) regra de escolha e 2) e 3) regras de seleção.	37
3.4	Representação ilustrativa do modelo Single Step (SS) com as condições iniciais, em a) representação do modelo SS em (1 + 1) dimensão, e em b) modelo SS (2 + 1) dimensão.	39
3.5	Representação ilustrativa do modelo SS em dimensão (1 + 1). Figura a) representação com algumas configurações efetivadas e outras ainda a serem efetivas e com sítios escolhidos (laranja, vermelho e verde), presença da regra 1) regra da escolha. Figura b) efetivação das possíveis configurações, obedecendo às regras: 2) (vermelho) e 3) (verde) respectivamente, a partícula (laranja) é recusada por não assumir nenhuma das regras. Figura c) representação das novas posições a partir das configurações.	40

3.6	Figura a) Curvas de crescimento $w(t) \times t$, na escala $\log \times \log$ para o modelo SS em $(1 + 1)$ dimensão. Figura b) Ajuste das rugosidades de saturação em função de L	41
4.1	Intensidade do ruído em função do tempo, para o modelo SS em $(2 + 1)$ dimensão. A curva superior (vermelho) representa o ruído aplicado, sem a presença das regras 2) e 3), enquanto que a curva inferior (verde) representa o ruído efetivo, isto é, o ruído resultante após a passagem pelas regras 2) e 3).	45
4.2	Intensidade efetiva do ruído, D_{eff} , em função da probabilidade p para o modelo SS em $(2 + 1)$ dimensão. A curva contínua corresponde à função $f(p) = c_1 - c_2(p - q)^\varphi$, c_1 e c_2 constantes ajustáveis e φ razão áurea. Na inserção tem-se D_{eff} em função de λ^2 . Os pontos em verde são para SS em $(1 + 1)$ dimensão e os pontos em vermelho referem-se aos resultados em $(2 + 1)$ dimensão.	46
4.3	Figura superior: representação de um retificador de meia onda, mostrando o sinal de entrada e o sinal de saída após a passagem pelo retificador. Na figura inferior, temos a representação comparativa do modelo de crescimento, com o ruído aplicado e que, após a passagem impostas pelas regras de seleção, retorna o ruído efetivo.	48
4.4	a) Superfície irregular ou rugosa, apresentando escalonamento fractal com dimensão d_f entre $1 \leq d_f \leq 2$. Figura adaptada de. b) Geometria fractal da superfície $(2 + 1)$ dimensões. Em destaque uma célula unitária usada para o cálculo da d_f , onde o tamanho total da superfície S_T é dado por $S_T \propto \Delta l^{d_f-d}$ e $\Delta x = \Delta y = \Delta l$	50

Lista de Símbolos

L	tamanho lateral do substrato/domínio, p. 2
α	expoente de rugosidade, p. 7
β	expoente de crescimento, p. 6
λ	crescimento lateral, p. 28
\bar{h}	altura média, p. 5
d	dimensão inteira do espaço, p. 2
d_f	dimensão fractal do espaço, p. 8
$h(x, t)$	altura da superfície no ponto x e no instante t , p. 2
t	tempo, p. 2
t_{sat}	tempo de saturação, p. 6
$w(L, t)$	rugosidade da superfície, p. 5
$w_{sat}(L)$	rugosidade de saturação, p. 6
x	direção espacial, p. 2
z	expoente dinâmico, p. 7

Lista de Abreviaturas

DB	Deposição Balística, p. 4
EW	Edwards-Wilkinson, p. 4
KPZ	Kardar-Parizi-Zhang, p. 4
SS	Single-Step, p. 4
TFD	Teorema de Flutuação Dissipação, p. 8

Capítulo 1

Introdução

Fenômenos de crescimento são encontrados nos mais diversos sistemas da natureza, como em colônia de bactérias, crescimento de tumores, propagação de chamas em uma floresta. Podem ainda ser encontrados em processos de alta tecnologia, como em crescimento de cristais, criação e desenvolvimento de filmes finos, entre outros (vide a figura 1.1). De maneira geral, crescimento de superfícies tem sido amplamente estudado pela ciência tanto do ponto de vista de fundamentos (teórico) quanto experimental, e que, por sua vez, desempenha papel fundamental para o desenvolvimento de novas tecnologias [1, 2, 3, 4, 5, 6].

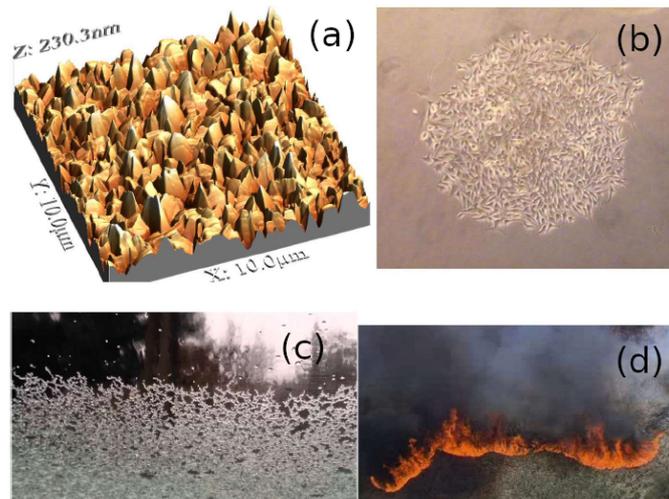


Figura 1.1: Exemplos de crescimento: (a) filme fino, (b) colônia de células tumorais, (c) depósito formado pelo acúmulo de flocos de neve no para-brisa de um carro e (d) queimada de uma floresta. Figura adaptada da referência [7].

Nessa área de pesquisa, a superfície é definida como sendo a interface existente entre dois meios distintos. Como, por exemplo, a interface entre os meios A e B ilustrada na figura 1.3. Além disso, a altura, $h(x, t)$ pode ser definida como sendo a altura da superfície no ponto x e no instante t , sendo L representando o tamanho lateral do substrato/domínio. Dessa forma, podemos caracterizar tanto a morfologia da superfície quanto a sua dinâmica temporal [1]. De maneira geral, $h(\mathbf{x}, t)$, pode representar a altura da posição \mathbf{x} no espaço de dimensão d . Desde que $h(\mathbf{x}, t)$ tenha propriedades de escala diferentes de \mathbf{x} , dizemos que $(h(\mathbf{x}, t), \mathbf{x})$ formam um espaço dimensional $d + 1$ ¹.

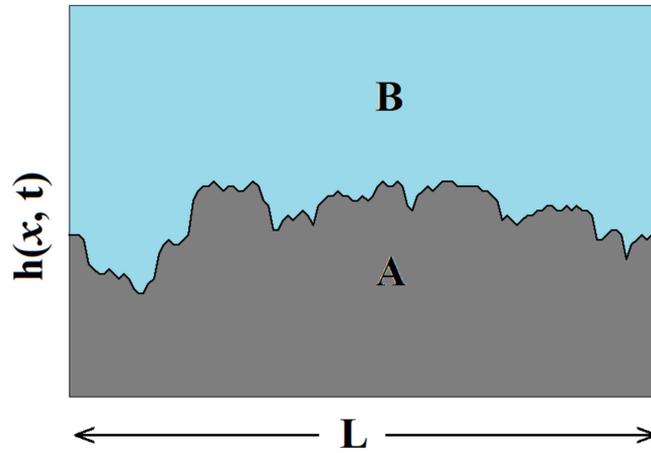


Figura 1.2: Representação do crescimento superficial (cinza), a curva em destaque (preto) representa a interface que separa os meios A e B, a altura da superfície no ponto x e no instante t , é representado por $h(x, t)$ e L corresponde ao tamanho lateral do substrato/domínio. Figura adaptada da referência [8].

É interessante mencionar que nosso interesse é voltado ao estudo dessa evolução, ou seja, como ocorre o crescimento da interface superficial no decorrer do tempo, visando a uma melhor interpretação dos elementos associados à dinâmica de crescimento. O estudo desses processos pode ser realizado através de métodos experimentais, simulação computacional e/ou cálculos analíticos. Desse modo, a investigação da dinâmica temporal de $h(\mathbf{x}, t)$ é de suma importância para uma caracterização mais precisa das propriedades e características da dinâmica de interfaces. Mostramos, na figura 1.3 (a), um exemplo de crescimento (deposição de cristais de neve) e a sua

¹Note que x é utilizado para fins de substratos unidimensionais enquanto $\mathbf{x} \equiv \vec{x}$ refere-se aos casos em que o substrato pertence a um espaço vetorial de dimensão maior que 1.

representação discreta (modelagem computacional) em (b).

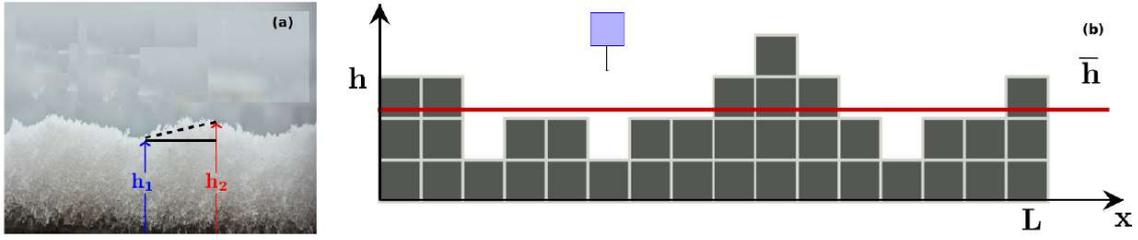


Figura 1.3: (a) Representação ilustrativa da deposição de cristais de neve em uma vidraça, possibilitando a determinação da variação entre duas alturas distintas, h_1 e h_2 . Em (b) é representado um processo de crescimento discretizado (modelagem discreta do fenômeno), com a altura h em função do tamanho do substrato L , em uma direção x . A linha horizontal, \bar{h} , representa a altura média em um instante de tempo t . Figura extraída da referência [9].

A caracterização microscópica precisa do fenômeno de crescimento é muito difícil, pois ela pode depender de muitos fatores físico-químicos como, por exemplo, a magnitude das energias de ligação entre átomos envolvidos, bem como o controle dos parâmetros externos, tais como o tamanho dos substratos e tempo de realização do experimento e/ou simulação. Outras características que referenciam processos de crescimento e são atribuídas ao processo de evolução das interfaces podem ser vistas por meio da deposição, difusão ou dessorção[1].

A deposição refere-se a uma partícula que, ao ser depositada, atinge a superfície e adere a ela. Na difusão, por sua vez, ocorre a deposição e, no momento em que a partícula atinge a superfície pode-se movimentar sobre esta até encontrar um sítio (posição) que lhe seja mais favorável (por exemplo, posição de menor energia). Já a dessorção é processo inverso à deposição. Nesse caso, a partícula tende a escapar da superfície, isto é, da posição em que se encontra, ocasionada por algum fator externo, podendo este ser de natureza mecânica, ou não [1, 10, 11].

Dessa maneira, diferentes sistemas complexos podem ser formados por diferentes partículas (átomos ou moléculas) e por diferentes mecanismos de crescimento. Apesar dessas particularidades, esses sistemas podem apresentar características universais. Apesar de serem tão distintas entre si (ver figura 1.1), podem apresentar propriedades em comum, por exemplo, sistemas que compartilham o mesmo con-

junto de expoentes de escala, distribuição de alturas, covariâncias espaciais e temporais, entre outros. Essas semelhanças mostram que podemos reunir sistemas com propriedades semelhantes em uma mesma classe de universalidade [1, 7].

Portanto, o estudo associado à universalidade tem como característica a observação e análise de propriedades dinâmicas e/ou geométricas associadas a essas interfaces, permitindo, por sua vez, investigar os mecanismos fundamentais (fenômenos) pertencentes a uma mesma classe de universalidade. Na literatura, já são conhecidas algumas classes de universalidades, como a classe de Edwards-Wilkinson (EW) e a de Kardar-Parizi-Zhang (KPZ) as quais apresentaremos com maior detalhe no Capítulo 2.

Nesse sentido, a universalidade nos permite propor teorias e modelos gerais que, embora possam desprezar a natureza física/química das interações microscópicas, permitem descrever os mecanismos básicos de crescimento. Por exemplo, o comportamento de crescimento de interfaces, através do tempo, pode ser modelado via equações diferenciais parciais estocásticas, como a equação de EW (linear) [12] e KPZ (não-linear) [13]. Embora existam muitos trabalhos analíticos e numéricos na literatura [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20], a busca por soluções exatas continua, particularmente, para o caso de KPZ [21].

Uma outra abordagem comumente utilizada na literatura é o uso de modelos computacionais discretos que empregam um conjunto mínimo de regras (algoritmo) visando a uma caracterização mais precisa da dinâmica de crescimento observada computacionalmente [1, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29]. Como exemplos de modelos de crescimento, temos o modelo de *Deposição Balística* (DB) [30], modelo de *Etching* (corrosão) [26, 31], modelo *Restricted Solid-on-Solid* (RSOS) [32] que pertencem à classe de KPZ e o modelo *Deposição Aleatória com Relaxação Superficial* (DARS) [33, 34] que pertence à classe de EW.

Um outro modelo particularmente interessante é o modelo *Single-Step* (SS) [30, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41] que, a depender da escolha de um parâmetro, podemos simular tanto na classe de EW quanto na de KPZ [41]. Esse modelo será explicado

em detalhes no Capítulo 3, pois faremos uso em nossas investigações. É interessante mencionar que existem outros modelos propostos na literatura; para revisão ver [1, 7, 25, 37, 42, 43, 44, 45].

No que se segue apresentaremos outros conceitos essenciais, os nossos objetivos, assim como a organização da tese.

1.1 Crescimento de interfaces rugosas

Uma quantidade fundamental no estudo da dinâmica de crescimento é a rugosidade (aspereza) de uma superfície. Com ela, podemos buscar similaridades entre diferentes sistemas, como os apresentados na figura 1.1.

Matematicamente, a rugosidade, $w(L, t)$, pode ser definida como:

$$w(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^L (h_i(t) - \bar{h}(t))^2}, \quad (1.1)$$

onde L representa o tamanho do substrato, d a dimensão do espaço e \bar{h} representando a média no tempo, definido sob a forma:

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^L h_i(t). \quad (1.2)$$

Dessa maneira, a rugosidade $w(L, t)$ tem como característica quantificar flutuações da altura da interface, ou seja, a rugosidade corresponde estatisticamente ao desvio padrão. É conveniente notar que definimos, inicialmente, um substrato de tamanho L , discretizado sobre o eixo das abcissas, de forma que $1 \leq i \leq L$, onde i representa o sítio (local) onde ocorrem as deposições/dessorções das partículas; já o eixo das ordenadas representa a altura do substrato, denotado por $h(x, t)$. Vide figura 1.3 (b).

É interessante mencionar que estamos particularmente interessados em sistemas que apresentam rugosidade de saturação como os ilustrados na figura 1.4. Durante o processo de crescimento é observada a presença de duas etapas principais: uma

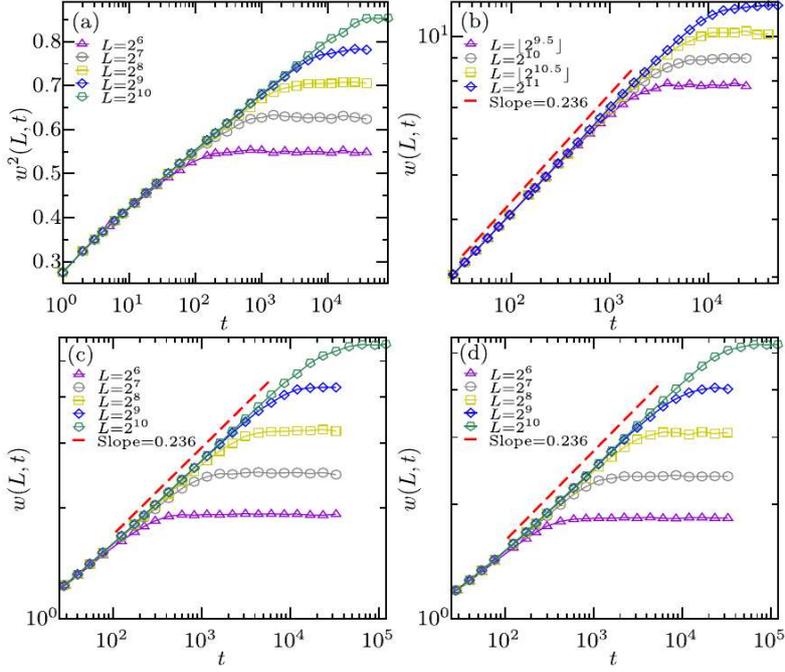


Figura 1.4: Evolução da rugosidade, $w(L, t)$ em função do tempo em escala $\log \times \log$. Resultados referentes a diferentes modelos de crescimento em $(2 + 1)$ dimensões: (a) modelo de *Family*, (b) modelo de *Etching*, (c) e (d) modelo SS com $p = 1$ e $p = 0.05$ respectivamente. Figura retirada da referência [46].

primeira na qual a rugosidade $w(L, t)$ cresce segundo uma lei de potência em função do tempo,

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

onde β é o expoente de crescimento. Observe na figura 1.4 que a rugosidade cresce com o tempo de maneira similar para os modelos em (b), (c) e (d) os quais pertencem à classe de universalidade de KPZ, sendo o valor exato de $\beta = \sqrt{5} - 2 \approx 0.2360$ em $(2 + 1)$ dimensões, apresentado por Gomes-Filho e colaboradores[21]. Resultados referentes ao modelo Family (a) pertencem a classe de EW [46].

Para a segunda etapa, observa-se na figura 1.4, que, após um certo tempo, denotada por tempo de saturação t_{sat} a rugosidade, $w(L, t) \rightarrow w_{sat}(L)$ torna-se dependente do tamanho do substrato L , passando a ser chamada de rugosidade de saturação e satisfazendo a relação:

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

o expoente α é chamado de expoente de rugosidade e tem por premissa a caracterização de informações a respeito da rugosidade do sistema quando este atinge o equilíbrio.

Cabe ainda ressaltar que tanto a rugosidade quanto o tempo em que o sistema satura, depende do tamanho do sistema. Dessa forma, quanto maior for o sistema, maiores serão os valores da rugosidade e do tempo de saturação, isto é,

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

o expoente z é chamado de expoente dinâmico do sistema.

Uma importante propriedade obtida por Family e Vicsek após a análise de modelos de crescimentos é a forma da associação do conjunto de expoentes (α, β, z) , mostrando que estes não são independentes, mas que estão conectados entre si [47].

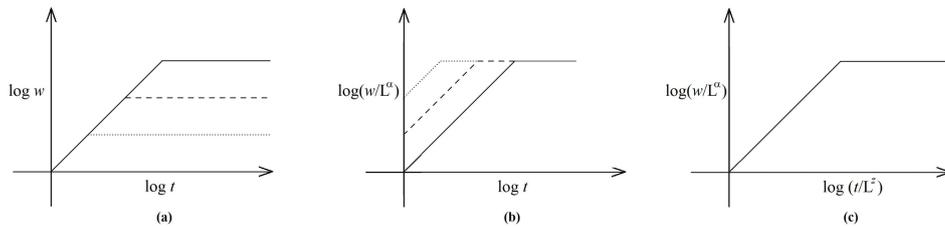


Figura 1.5: Esquema representativo dos passos envolvidos no reescalonamento da rugosidade em função do tempo. Figura extraída da referência [1].

Family e Vicsek [47] analisaram várias curvas de crescimento para diferentes modelos (similar à figura 1.4). Eles observaram que era possível colapsar todas as curvas em uma única curva, conforme ilustrado na figura 1.5. Em (a) é mostrado a rugosidade como função do tempo para três tamanhos diferentes de L . Em (b), a rugosidade é dividida por L^α , com isso as curvas saturam no mesmo valor da ordenada, $\log\left(\frac{w}{L^\alpha}\right)$. Já em (c), mostra-se a reescala do tempo, dividindo o mesmo por L^z , resultando em uma única curva de crescimento.

Dessa forma, podemos escrever que

$$w(L, t) \propto L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (1.6)$$

onde

$$f(u) = \begin{cases} u^\beta, & \text{para } u \ll 1 \\ \text{const}, & \text{para } u \gg 1 \end{cases}, \quad (1.7)$$

a função $f(u)$ é chamada função escala [47].

A relação de escala proposta por Family e Vicsek [47] tem um papel fundamental, não somente por mostrar o colapso universal das curvas de crescimento, mas também por estabelecer uma relação universal entre os expoentes de crescimento. Utilizando a Eq. (1.3) no ponto em que o sistema satura, temos que $w_{sat}(L) \sim t_{sat}^\beta$, ao passo que pela Eq. (1.4), encontramos que $t_{sat}^\beta \sim L^\alpha$. Aplicando a Eq. (1.5), pode-se concluir que

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (1.8)$$

Como pode ser observado, os expoentes de crescimento estão diretamente relacionados entre si, mas são independentes de detalhes particulares de cada sistema [1]. É importante salientar que, no caso da classe de universalidade de KPZ, temos uma outra equação que relaciona os expoentes $\alpha + z = 2$, denotada por invariância galileana [13].

Apresentaremos, a seguir, o objetivo geral do nosso trabalho, bem como os objetivos específicos.

1.2 Objetivo Geral

Esta tese tem como principal objeto de estudo investigar as implicações da dimensão fractal, d_f , da superfície no teorema de flutuação-dissipação (TFD) associado à classe de universalidade de KPZ [21].

1.2.1 Objetivos Específicos

- Simular o modelo *Single-Step*, em $(d + 1)$ dimensão, com $d = 2$.
- Compreender como a intensidade do ruído está relacionada com as regras e

parâmetros do modelo SS.

- Entender por que a associação entre a dimensão fractal da superfície e os expoentes de crescimento permitiu aos autores [21] encontrar solução analítica para os expoentes em $(2 + 1)$ dimensão.

No que se segue, apresentamos a organização da tese.

1.3 Organização da Tese

No Capítulo 1, apresentamos uma revisão bibliográfica, evidenciando os conceitos fundamentais para a caracterização da dinâmica de crescimento entre eles, a definição da altura média e rugosidade, elementos fundamentais no desenvolvimento e compreensão dos processos evolutivos das interfaces. Ainda nesse Capítulo apresentamos os conceitos de universalidade, classes de universalidade e os expoentes de rugosidade (α), crescimento (β) e dinâmico (z), indispensáveis na classificação de modelos numa das classes de universalidade [1, 10, 47].

No Capítulo 2, faremos uma breve apresentação dos processos estocásticos, seguida da equação de Langevin. Modelaremos, ainda, as equações de crescimento via equações diferenciais parciais estocásticas; as equações de Edwards-Wilkinson [12], seguida da equação de Kardar-Parisi-Zhang [13], descrevendo o conjunto dos expoentes (α, β, z) em $(1 + 1)$ dimensão, para cada uma das equações de crescimento.

No Capítulo 3 expõe-se uma revisão dos autômatos celulares, de onde prosseguimos com a apresentação de alguns modelos de crescimento, como o modelo de *Deposição Aleatória* (DA), *Deposição Balística* (DB), modelo de *Etching* e o modelo *Single-Step* (SS), sendo este último importante no nosso trabalho.

No Capítulo 4, apresentamos nossos resultados quando compreendemos a relação entre o ruído aplicado e o ruído efetivo a partir das regras do modelo SS. Investigamos o envolvimento da dimensão fractal da superfície no teorema de flutuação-dissipação. Evidenciamos a aplicação e importância do trabalho de Gomes-Filho e colaboradores [21] no contexto do crescimento de superfícies em $(2 + 1)$ dimensões.

É conveniente ressaltar que os resultados apresentados neste trabalho culminaram na publicação *The fractal geometry of growth: Fluctuation-dissipation theorem and hidden symmetry*. *Frontiers in Physics*, v. 9, 2021. No Capítulo 5, apresentamos nossas conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Modelando equações de crescimento

2.1 Processos Estocásticos

Antes de iniciarmos a modelagem do crescimento, convém observar que a maioria dos observáveis físicos acessíveis a medições experimentais (compreende) muitos componentes: partículas ou átomos. Acontece que, para entender o resultado dos experimentos de medição e reivindicar sua previsibilidade, não é possível nem razoável seguir o movimento de todos esses constituintes. Em vez disso, usamos o conceito de desvios do resultado esperado. Da mesma forma, o movimento errático do pólen em suspensão aquosa é o resultado de muitas colisões com as moléculas do solvente [48, 49]. A agitação (o deslocamento em ziguezague) das moléculas de pólen observadas e as mudanças abruptas de velocidades no curso de seu movimento resultam dessas colisões alimentadas por ruído térmico [50, 51, 52, 53, 54, 55]. Esse é o ruído térmico que força o movimento e causa distúrbios observáveis de trajetórias; a mesma fonte de flutuações fornece energia para motores moleculares [56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65], potencializa caminhos reativos químicos [66] e pode amplificar o sinal no fenômeno de ressonância estocástica [67, 68] e crescimento [1, 12, 13, 23, 25, 26, 31, 39, 42, 69, 70]. As implicações das flutuações são cruciais em muitas áreas das ciências naturais, desde sistemas microscópicos e biologia molecular até ecologia, modelos de mercados financeiros [71], análise de contatos sociais [72] e dinâmica climática [73].

2.2 Equação de Langevin

Embora a ideia de processos estocásticos já estivesse contida nos trabalhos originais de Boltzmann e Einstein, Langevin explicitou essa nova era na física considerando a equação de movimento para uma partícula se movendo em um fluido como [50]:

$$m \frac{dv(t)}{dt} = -m\gamma v(t) + f(t), \quad (2.1)$$

onde m e γ são respectivamente a massa da partícula e o atrito. A proposta engenhosa e elegante foi de modular as interações complexas entre as partículas, considerando todas as interações como duas forças principais. A primeira contribuição representa uma força de atrito, $-m\gamma v$, cuja escala de tempo característica é $\tau = \gamma^{-1}$, enquanto a segunda contribuição vem de uma força estocástica, $f(t)$, com escala de tempo $\Delta t \ll \tau$, que está relacionada com as colisões aleatórias entre a partícula e as moléculas do fluido. A força flutuante $f(t)$, na Eq. (2.1), obedece às seguintes condições: (i) a força média devido às colisões aleatórias na partícula é zero

$$\langle f(t) \rangle = 0, \quad (2.2)$$

(ii) não há correlação entre a velocidade inicial da partícula e a força aleatória

$$\langle f(t)v(0) \rangle = 0, \quad (2.3)$$

e (iii) a força aleatória em momentos diferentes t e t' não são correlacionados

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \sigma \delta(t - t'), \quad (2.4)$$

sendo σ uma constante a ser determinada. A equação acima é conhecida como processo gaussiano ou também chamado de ruído branco. Para entender as propriedades dinâmicas de uma partícula que obedece à equação de movimento (2.1) e as

condições (2.2) to (2.4), começamos com o seguinte solução:

$$v(t) = v(0) + \int_0^t \exp[-\gamma(t-t')]f(t')dt'. \quad (2.5)$$

Depois de um longo tempo, o sistema atinge o equilíbrio, isso significa que

$$\langle v^2(t \rightarrow \infty) \rangle = \langle v^2 \rangle_{eq} = k_B T / m. \quad (2.6)$$

(ou seja, o teorema da equipartição). Em seguida, usamos as condições acima para obter $\sigma = 2m\gamma k_B T$ e reescrever a Eq. (2.4) como:

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 2m\gamma k_B T \delta(t-t'). \quad (2.7)$$

Essa última relação é o teorema de flutuação-dissipação (TFD). A bela e simples abordagem de Langevin ajuda-nos a lidar com muitas situações na física. Ele nos permite fazer alguns cálculos analíticos para alguns modelos simplificados e até mesmo obter alguns limites para sistemas mais complexos. Também é fácil realizar experimentos de computador dentro de sua estrutura. Portanto, a equação de Langevin e sua formulação quântica [74, 75], com o conceito de campos flutuantes, abriu um amplo ramo de investigações em muitos sistemas, como espalhamento de luz [76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83], espalhamento de nêutrons em metais líquidos [84, 85], dinâmica de cadeia polimérica [86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96], motores moleculares [64, 97, 98], condutividade [99, 100], teoria de taxas de reação [101, 102, 103, 104, 105] e sincronização [106, 107, 108, 109, 110, 111, 112, 113]. O uso de conceitos de difusão encontra muitas aplicações na ciência, por exemplo, na entrega controlada de medicamentos, o bom entendimento dos mecanismos de liberação de medicamentos, bem como os tempos de liberação característicos é uma necessidade [23, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120]. Todos esses fenômenos, no entanto, são algumas formas do amplo, realmente amplo campo de difusão anômala [57, 63, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 133].

Os dois termos do lado direito da Eq. (2.1) atuam como um reservatório de calor. Assim, após o sistema atingir o equilíbrio, o TFD garante alguma forma de conservação de energia. I.e. pequenas flutuações em torno do valor médio da energia.

A violação do TFD é bem conhecida na literatura, em vidros [134, 135, 136, 137, 138], proteínas [139], na transferência de calor radioativo mesoscópico [140, 141], na difusão balística [122, 124, 142, 143, 144, 145] e, particularmente, na dinâmica KPZ [13, 25]. Para uma revisão sobre processos estocásticos ver [146, 147, 148].

2.3 Modelando equações de crescimento

Iniciamos a seção de modelagem de equações de crescimento, considerando o uso das equações diferenciais parciais estocásticas e métodos para obtenção de seus expoentes.

A modelagem matemática de crescimento de interfaces busca descrever o processo de evolução da altura da superfície $h(\mathbf{x}, t)$, com \mathbf{x} representando a posição no substrato e t o tempo. Essa evolução temporal está associada a um fluxo de partículas $\Phi(\mathbf{x}, t)$ que atinge a superfície [1],

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \Phi(\mathbf{x}, t). \quad (2.8)$$

Esse fluxo emana duas principais contribuições: uma, determinística F e outra, correspondendo ao caráter aleatório nas deposições, associado a um termo estocástico, $\xi(\mathbf{x}, t)$, o que representa as flutuações das alturas no sistema. Dessa forma, uma equação diferencial de crescimento passa a ser escrita na forma

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = F(h, \mathbf{x}, t) + \xi(\mathbf{x}, t), \quad (2.9)$$

o termo $F(h, \mathbf{x}, t)$ é uma função geral. O termo $\xi(\mathbf{x}, t)$, é comumente denotado por ruído branco, isto é, possui as propriedades

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \rangle = 0, \quad (2.10)$$

o ruído tem média configuracional zero e não é correlacionado nem no espaço nem no tempo,

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (2.11)$$

onde $\langle \dots \rangle$ representa o valor esperado da variável, D é a constante de dispersão das partículas (intensidade do ruído), e d é a dimensão em que se encontra inserido o sistema.

Principiando uma investigação dos sistemas de crescimento e suas correspondentes classes de universalidade, começamos com o sistema de crescimento denominado Deposição Aleatório (DA) que, por sua simplicidade, permite uma construção via equação diferencial parcial estocástica [1, 43].

2.4 Deposição Aleatória

Considerando $F(h, \mathbf{x}, t) = \text{constante} = F$, denotando o número médio de partículas depositadas na posição \mathbf{x} , a obtenção das propriedades estatísticas das interfaces são obtidas por simples integração da Eq. (2.9), o que fornece

$$h(\mathbf{x}, t) = Ft + \int_0^t \xi(\mathbf{x}, t') dt'. \quad (2.12)$$

Considerando a média das alturas, $\langle h(\mathbf{x}, t) \rangle$, segue

$$\langle h(\mathbf{x}, t) \rangle = Ft, \quad (2.13)$$

e tomando o quadrado de (2.12), obtemos:

$$\langle h^2(\mathbf{x}, t) \rangle = F^2 t^2 + 2Dt. \quad (2.14)$$

Estamos interessados no comportamento da rugosidade da interface (como, por

exemplo, na Eq. (1.1)), isto é,

$$\begin{aligned}
 w(t) &= \left(\langle h^2(\mathbf{x}, t) \rangle - \langle h(\mathbf{x}, t) \rangle^2 \right)^{1/2} \\
 &= \left(F^2 t^2 + 2Dt - (Ft)^2 \right)^{1/2} \\
 &= (2Dt)^{1/2}.
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

Desse modo, a rugosidade cresce com o tempo de forma ilimitada e obedece à lei de potência, $w \sim t^{1/2}$. Com efeito, pode-se mostrar que a deposição aleatória possui somente o expoente de crescimento $\beta = \frac{1}{2}$. Uma característica para esse caso é que, como a rugosidade cresce de forma indefinida, resulta, como consequência, a não definição dos expoentes de rugosidade (α) e dinâmico (z).

2.5 Princípios de simetria

Dando prosseguimento às equações de crescimento, consideremos, agora, uma superfície caracterizada pela altura $h(\mathbf{x}, t)$ e assumimos que, no tempo $t = 0$, a superfície apresenta rugosidade nula $w(L, 0) = 0$. A evolução temporal desse crescimento é dada por uma equação diferencial estocástica contínua, dada pela Eq. (2.9)

Tomando como exemplo a interface apresentada na figura 1.3, observa-se que, ao trocar o meio A pelo meio B, as propriedades da interface não sofrem alteração. Portanto, tratar como uma deposição/dessorção, a equação de crescimento deve ser a mesma.

A busca para determinação de padrões (ou simetrias) é comum em vários campos da física, matemática, química e biologia [1, 47, 149, 150, 151]. Os princípios de simetrias consistem em um conjunto de informações associadas à invariância de um objeto ou a um sistema frente a uma determinada transformação, e essas transformações são definidas pelos processos que seguem, discutidos a partir das equações de crescimento:

1. **Invariância temporal:** um sistema é invariante no tempo se, após um retardo

ou avanço no tempo, denotado por δt no sinal de entrada, resultar em um deslocamento de tempo idêntico ao sinal de saída. Em outras palavras, as características de um sistema invariante no tempo não alteram com a mudança de t para $t + \delta t$. Na equação de crescimento, a função F não depende do tempo, daí segue,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial h}{\partial (t + \delta t)}.$$

2. **Invariância na direção do crescimento:** o sistema é invariante em relação à direção de seu crescimento se, após uma elevação/diminuição em seu crescimento δh , a sua altura permanecer inalterada. Ou seja, a transformação $h \rightarrow h + \delta h$ na altura não interfere no sistema. Com isso, os termos da altura da função F são excluídos, devendo permanecer a combinação de suas derivadas $\nabla^n h$ com $n > 0$.
3. **Invariância perpendicular na direção do crescimento:** de maneira similar à invariância temporal e na direção do crescimento, o sistema deve ser invariante à origem do vetor \mathbf{x} , ou seja, a transformação $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \delta \mathbf{x}$ não deve afetar o sistema. Dessa forma, a função F não depende da posição inicial, fazendo com que nenhum termo explícito de \mathbf{x} deva permanecer, com exceção das combinações de suas derivadas em \mathbf{x} , ou seja, $\frac{\partial^n}{\partial \mathbf{x}^n}$, com $n > 0$.
4. **Simetria de rotação e inversão em torno da direção do crescimento:** sistemas invariantes em relação à rotação e à inversão devem ser independente da direção do eixo coordenado paralelo à superfície. Na equação de crescimento, a função F não depende da direção do eixo da coordenada paralela à superfície. Em outras palavras, o sistema deve ser invariante com relação à inversão de $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$, então $\frac{\partial h}{\partial (\mathbf{x})} = -\frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}}$, o que faz com que $\frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}}$ mude de sinal e, portanto, deva ser excluído. Essa condição exclui qualquer derivada de ordem ímpar, isto é, os termos $\nabla^{2n+1} h$, com $n = 0, 1, 2, \dots$, mas, permite a presença de termos do tipo $(\nabla^{2n+1} h)^{2m}$, $m = 1, 2, 3, \dots$

5. **Simetria up/down (para cima e para baixo) da altura:** nesse caso, a determinação das flutuações na interface devem ser similares em relação à altura, isto é, a equação de crescimento não sofre alteração devido à transformação, $h \rightarrow -h$. Essa condição exclui qualquer derivada do tipo $(\nabla^n h)^{2m}$, $m = 1, 2, 3, \dots$, permitindo apenas os termos cujas derivadas sejam pares, $\nabla^{2n} h$.

2.6 Equação de Edwards-Wilkinson (EW)

Descreveremos agora a equação proposta por Edwards e Wilkinson, em 1982 [12], que tem por objetivo modelar o processo de crescimento de interfaces rugosas, bem como a ocorrência tanto nos processos de deposição como de sedimentação. Considerando os princípios de simetria, a equação geral de crescimento, (2.9), é descrita como

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^n (\nabla^{2i} h) + \sum_{j,k=1}^{m,l} (\nabla^{2j} h) (\nabla h)^{2k} + \xi(\mathbf{x}, t). \quad (2.16)$$

Para determinar as propriedades de escala, é analisado o comportamento assintótico, no qual se observa que, para tempos longos, grandes substratos e com variação da rugosidade pequena. Nesse limite fica evidente que as derivadas de ordem maior tornam-se irrelevantes em relação às derivadas de menor ordem¹, passando a considerar o termo de menor ordem, no caso $\nabla^2 h$. Dessa forma, a equação de crescimento mais simples obtida a partir dos princípios de simetria é a equação

¹Esse fato pode ser observado a partir das seguintes comparações, ao fazermos as transformações de autoafinidade, $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' \equiv b\mathbf{x}$ e $h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h$, os termos são reescalados por,

$$\nabla^2 h \rightarrow \nabla'^2 h' \equiv b^{\alpha-2} \nabla^2 h,$$

$$\nabla^4 h \rightarrow \nabla'^4 h' \equiv b^{\alpha-4} \nabla^4 h,$$

daí no limite hidrodinâmico ($b \rightarrow \infty$), os termos $\nabla^2 h$ e $\nabla^4 h$ tendem a zero, porém o termo $\nabla^4 h$ tende a zero muito mais rápido. Logo os termos de menor ordem são mais relevantes. De maneira análoga, o mesmo acontece com os termos $(\nabla^{2j} h) (\nabla h)^{2k}$ em relação ao termo $\nabla^2 h$.

de Edwards-Wilkinson (EW)[12], que se trata de uma equação diferencial linear

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \xi(\mathbf{x}, t), \quad (2.17)$$

o coeficiente ν é a tensão superficial que, em conjunto com o termo $\nabla^2 h$, tende a suavizar a interface, redistribuindo a rugosidade e mantendo a altura média. Ver figura 2.1; quanto maior o seu valor mais rápido o sistema satura. O ruído $\xi(\mathbf{x}, t)$, obedece às propriedades (2.10) e (2.11).

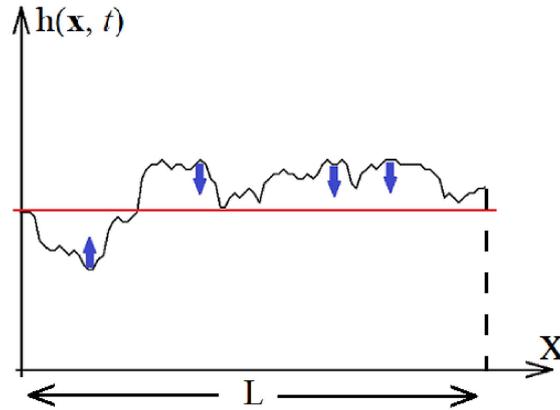


Figura 2.1: Esquema representativo da atuação da tensão superficial sobre uma interface de crescimento. A linha paralela ao eixo x , representa a altura média do sistema, as setas (em detalhes) representam a atuação do laplaciano, que força a suavização da interface. Figura adaptada de [152].

2.6.1 Os expoentes da equação de Edwards-Wilkinson

A obtenção dos expoentes críticos para a Eq. (2.17) será feito com os métodos ajustes de escalas e Transformada de Fourier, de onde determinaremos a classe de universalidade. O primeiro método, por ser considerado mais simples, será de uso direto na equação, enquanto que o segundo método é usado no espaço de frequência.

2.6.1.1 Método de ajuste de escala

Inicialmente determinam-se a escala e a transformação as quais devem ser aplicadas ao crescimento. Por se tratar de uma interface de crescimento autoafim, são permitidas transformações horizontais (em \mathbf{x}) e verticais (em h), de forma que

a grandeza \mathbf{x} é reescalada por $\mathbf{x}' = b\mathbf{x}$, sem variações na equação e, a partir desse reescalamento, são obtidas as novas escalas para as grandezas h , w e t , além do ruído $\xi(\mathbf{x}, t)$.

Como definido anteriormente, a rugosidade da superfície é obtida através da flutuação quadrática média das alturas. O valor da rugosidade w é proporcional a t^β para tempos curtos e proporcional a L^α para tempos longos. Dessa forma, faremos uso da definição de rugosidade de saturação, w_{sat} , e sua dependência em relação ao coeficiente de saturação α , Eq. (1.4).

Inicialmente, consideramos a mudança da variável \mathbf{x} para L , com as adequações necessárias às relações da interface de crescimento

$$\mathbf{x} = b\mathbf{x}' \rightarrow L = bL'. \quad (2.18)$$

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

$$w_{sat} \sim L^\alpha \rightarrow w_{sat} = (bL')^\alpha = b^\alpha L'^\alpha, \quad (2.19)$$

como $w'_{sat} \sim L'^\alpha$, segue que

$$w_{sat} = b^\alpha w'_{sat}, \quad (2.20)$$

assim, a nova escala para a rugosidade é dada por

$$w = b^\alpha w'. \quad (2.21)$$

A relação (2.21) será útil na descrição da reescala para a altura h , a partir da Eq. (1.1),

$$w^2 = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^N (h_i(t) - \bar{h}(t))^2, \quad (2.22)$$

substituindo a Eq.(2.21) na Eq (2.22),

$$(b^\alpha w')^2 = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^N (h_i(t) - \bar{h}(t))^2,$$

$$w'^2 = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^N \left(b^{-\alpha} h_i(t) - b^{-\alpha} \bar{h}(t) \right)^2, \quad (2.23)$$

considerando a invariância da Eq. (2.22) sob transformação $w = b^\alpha w'$, isso significa que $b^{-\alpha} h_i = h'_i$ e $b^{-\alpha} \bar{h} = \bar{h}'$, daí segue que

$$h = b^\alpha h', \quad (2.24)$$

que é a reescala da altura h .

Como a rugosidade de saturação acontece a partir de um tempo de saturação, e como Eq. (1.5) mostra dependência em L , segue que $L = bL'$. Substituindo na Eq. (1.5),

$$t_{sat} \sim L^z \rightarrow t_{sat} = (bL')^z = b^z L'^z, \quad (2.25)$$

sem perda de generalidade, usamos $t'_{sat} \sim L'^z$, logo

$$t = b^z t'. \quad (2.26)$$

Para o ruído, usa-se a expressão (2.11), e fazendo uso das reescalas, (2.18 e 2.26), obtém-se

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(b(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')) \delta(b^z(t' - t'')),$$

fazendo uso da propriedade da função delta, $\delta^d(b\mathbf{x}) = \frac{1}{|b|^d} \delta^d(\mathbf{x})$, segue

$$|b|^{d+z} \langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \delta(t' - t''). \quad (2.27)$$

O lado direito é exatamente a equação de correlação do ruído $\xi(\mathbf{x}', t')$, e agora com a inserção do fator $|b|^{d+z}$, temos

$$\langle |b|^{\frac{d+z}{2}} \xi(\mathbf{x}, t) |b|^{\frac{d+z}{2}} \xi(\mathbf{x}', t') \rangle = \langle \xi(\mathbf{x}', t') \xi(\mathbf{x}'', t'') \rangle, \quad (2.28)$$

no que implica em:

$$|b|^{\frac{d+z}{2}} \xi(\mathbf{x}, t) = \xi(\mathbf{x}', t'), \quad (2.29)$$

de onde temos a reescala para o ruído:

$$\xi(\mathbf{x}, t) = |b|^{-\left(\frac{z+d}{2}\right)} \xi(\mathbf{x}', t'). \quad (2.30)$$

Agora, podemos ir para os cálculos dos expoentes. Para isso substituímos a reescala em cada termo da Eq. (2.17)

$$\frac{|b|^{\alpha-z} \partial h'(x', t')}{\partial t'} = \nu \frac{|b|^{\alpha-2} \partial^2 h(x', t')}{\partial x'^2} + |b|^{-\left(\frac{z+d}{2}\right)} \xi(x', t')$$

Como a equação deve ser invariante em relação à equação original, devemos impor ao coeficiente b , a condição $b^{\alpha-z} > 0$. Portanto, basta dividir todos os termos por $b^{\alpha-z}$, de onde segue

$$\frac{\partial h'(x', t')}{\partial t'} = \nu b^{z-2} \frac{\partial^2 h(x', t')}{\partial x'^2} + b^{\frac{z}{2}-\alpha-\frac{d}{2}} \xi(x', t'). \quad (2.31)$$

Independente das mudanças de escalas, a equação acima deve ser igual à Eq. (2.17), de forma que os coeficientes devem ser iguais, e daí temos os expoentes

$$\alpha = \frac{2-d}{2}, \quad \beta = \frac{2-d}{4}, \quad z = 2. \quad (2.32)$$

É conveniente ressaltar que a obtenção do expoente β deve-se à utilização da relação universal (1.8).

Para $d = 1$, os expoentes são:

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

Uma segunda alternativa na busca dos expoentes é facilitada pelo uso da transformada de Fourier, pois considerando que se trata de uma equação linear, esta pode ser resolvida analiticamente, como veremos a seguir.

2.6.1.2 Método da transformada de Fourier

Iniciamos com uma revisão das transformadas de Fourier e suas aplicações na equação de EW. Para uma revisão das transformadas de Fourier de forma geral, existe uma gama variada de livros. Recomendamos os livros [153, 154].

Aplicaremos a transformada de Fourier para cada um dos termos que compõem a equação de EW, descrita sob a forma

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = v \frac{\partial^2 h(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}^2} + \xi(\mathbf{x}, t). \quad (2.33)$$

Definimos a transformada de Fourier (TF) da função f , como sendo a função F que associa a cada função absolutamente integrável $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a função $\widehat{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, expressa por

$$\widehat{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (2.34)$$

Denotamos como transformada de Fourier inversa, a função F^{-1} que associa a cada função $\widehat{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ pertencente ao conjunto imagem de F a função absolutamente integrável $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, dada por

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(\omega) e^{i\omega x} d\omega. \quad (2.35)$$

Dessa forma, diz-se que, se f é contínua, então, $F^{-1}(F(f)) = f$.

Considerando as definições acima e tomando a função f por h ou ξ quando necessário, iniciamos a transformada de Fourier e sua inversa com a função da altura $h(\mathbf{x}, t)$.

1. Para a variável \mathbf{x} suas transformadas de Fourier e sua inversa, são respectivamente:

$$\widehat{h}(k, t)_{\mathbf{x}} = \int_{-\infty}^{\infty} h(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad (2.36)$$

e

$$h(\mathbf{x}, t)_{\mathbf{x}} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{h}(k, t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} dk. \quad (2.37)$$

2. Aplicando procedimento análogo para a variável t , temos:

$$\widehat{h}(\mathbf{x}, \omega)_t = \int_{-\infty}^{\infty} h(\mathbf{x}, t) e^{i\omega t} dt, \quad (2.38)$$

e

$$h(\mathbf{x}, t)_t = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{h}(\mathbf{x}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega. \quad (2.39)$$

3. Para as variáveis \mathbf{x} e t , simultaneamente, são obtidos:

$$\widehat{h}(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} h(\mathbf{x}, t) e^{-i(k\mathbf{x} - \omega t)} dt d\mathbf{x} \quad (2.40)$$

e

$$h(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{h}(k, \omega) e^{i(k\mathbf{x} - \omega t)} d\omega dk. \quad (2.41)$$

De posse das transformadas para as variáveis \mathbf{x}, t e \mathbf{x} e t , e aplicando em cada termo da Eq. (2.33),

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} e^{i\omega t} e^{-ik\mathbf{x}} dt d\mathbf{x} &= v \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 h(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}^2} e^{i\omega t} e^{-ik\mathbf{x}} dt d\mathbf{x} + \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\mathbf{x}, t) e^{-i(k\mathbf{x} - \omega t)} dt d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Resolvendo cada uma das primeiras integrais por integração por partes, e tendo o cuidado com as expressões (2.36) a (2.41), encontramos, para a primeira integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} e^{i\omega t} dt = -i\omega \widehat{h}(\mathbf{x}, \omega). \quad (2.43)$$

Repetindo o procedimento para, $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 h(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}^2} e^{-ik\mathbf{x}} d\mathbf{x}$, encontramos,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 h(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}^2} e^{-ik\mathbf{x}} d\mathbf{x} = -k^2 \widehat{h}(k, t). \quad (2.44)$$

Agora para a integral $\int_{-\infty}^{\infty} \xi(\mathbf{x}, t) e^{-i(k\mathbf{x} - \omega t)} dt d\mathbf{x}$, e considerando que o ruído depende

das variáveis \mathbf{x} e t

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{i\omega t} dt d\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \xi(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\mathbf{x} \right] dt, \quad (2.45)$$

segue,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\mathbf{x}, t) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} dt d\mathbf{x} = \widehat{\xi}(k, \omega). \quad (2.46)$$

Substituindo as Eq. (2.43), (2.44) e (2.46) na Eq. (2.42), resulta em

$$\widehat{h}(k, \omega) = \frac{\widehat{\xi}(k, \omega)}{\nu k^2 - i\omega}. \quad (2.47)$$

Podemos ver que a Eq. (2.47) é definida sob o domínio das frequências ω e dos momentos k , e usando mudanças de escala para cada termo a partir das reescalas definidas anteriormente, (2.18), (2.24) e (2.26). Fazendo uso da TF, encontram-se as relações de variáveis das funções originais para as variáveis k, ω, \widehat{h} e $\widehat{\xi}$. Iniciando pela TF da altura em relação as variáveis \mathbf{x} e t , expressão (2.40), encontramos:

$$\widehat{h}(k, \omega) = b^{\alpha+z+1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} h'(\mathbf{x}', t') e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}'} e^{i\omega b^z t'} dt' d\mathbf{x}'. \quad (2.48)$$

Como a função $\widehat{h}(k, \omega)$ não deve sofrer variações com reescalas para esta garantia, devemos reescalar k e ω , de forma que seja mantida a TF, assim sendo, $k \rightarrow k' = bk$ e $\omega \rightarrow \omega' = b^z \omega$, daí segue que

$$\widehat{h}(k, \omega) = b^{\alpha+z+1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} h'(\mathbf{x}', t') e^{-ik'\mathbf{x}'} e^{i\omega' t'} dt' d\mathbf{x}' \quad (2.49)$$

Pode ser visto que a integral resultante é a TF de $\widehat{h}'(k', \omega')$, portanto tem-se a reescala da altura no domínio das frequências e dos momentos

$$\widehat{h}(k, \omega) = b^{\alpha+z+1} \widehat{h}'(k', \omega'). \quad (2.50)$$

Partiremos agora na determinação da reescala do ruído nas mesmas condições.

Veja que, $\xi(\mathbf{x}, t) = b^{-\left(\frac{z+d}{2}\right)}\xi(\mathbf{x}', t')$, então

$$\widehat{\xi}(k, \omega) = b^{\left(\frac{z}{2}-\frac{d}{2}+1\right)} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\mathbf{x}', t') e^{-ik'\mathbf{x}'+i\omega't'} dt' d\mathbf{x}' \quad (2.51)$$

Usando o mesmo argumento da altura, segue que

$$\widehat{\xi}(k, \omega) = b^{\left(\frac{z}{2}-\frac{d}{2}+1\right)}\widehat{\xi}'(k', \omega'). \quad (2.52)$$

Com essas novas escalas (2.50), (2.52), $k \rightarrow k' = bk$ e $\omega \rightarrow \omega' = b^z\omega$, aplicamos na Eq. (2.47)

$$b^{\alpha+z+1}\widehat{h}'(k', \omega') = \frac{b^{\left(\frac{z}{2}-\frac{d}{2}+1\right)}\widehat{\xi}'(k', \omega')}{\nu\frac{k'^2}{b^2} - i\frac{\omega'}{b^z}}, \quad (2.53)$$

para que a equação permaneça invariante, devemos considerar o caso em que $z = 2$, então

$$b^{\alpha+\frac{d-2}{2}}\widehat{h}'(k', \omega') = \frac{\widehat{\xi}'(k', \omega')}{(\nu k'^2 - i\omega')}. \quad (2.54)$$

Ainda valendo a invariância, devemos ter $b^{\alpha+\frac{d-2}{2}} = 1$ e chegamos novamente nos mesmos resultados obtidos por reescalas, expressão (2.32) e os mesmos expoentes para $d = 1$. É interessante mencionar que, utilizando transformada de Fourier, encontramos a solução exata analiticamente. Essa abordagem apresentada pode ser estendida para outras formas de crescimento como, por exemplo, na aplicação do estudo das equações de EW com memória[155].

2.7 Equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ)

A seguir, apresentaremos uma extensão da Equação de Edwards-Wilkinson, Eq. (2.17), a equação proposta por Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) em 1986 [13], os autores propuseram uma forma de incluir o crescimento lateral na equação de crescimento.

No contexto matemático, essa inserção é feita por intermédio de um termo não

linear $(\nabla h)^2$, sendo, portanto, uma equação diferencial estocástica contínua não linear. Observa-se ainda que, nessa nova situação, ocorre uma quebra na simetria, a simetria de reflexão $h \rightarrow -h$, e a esse fenômeno é atribuída a presença de um crescimento perpendicular à interface, o que gera um crescimento nas laterais da interface. A presença dessa propriedade (crescimento lateral) é vista em modelos de crescimento tais como, deposição balística [1, 30], modelo de Eden [156], modelo de Etching [31] e muitos outros, para revisão ver [1, 7, 25, 37, 42, 43, 44, 45].

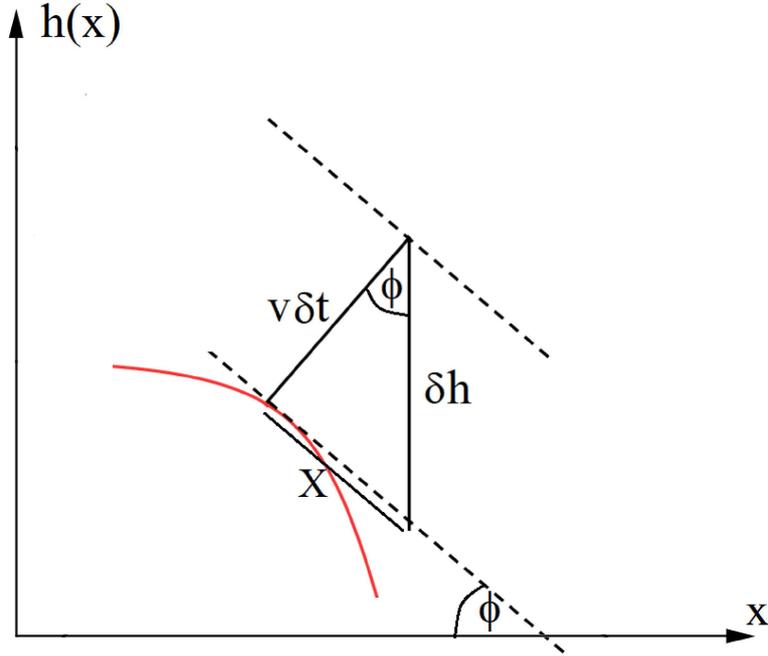


Figura 2.2: Origem do termo não linear na equação de KPZ, que apresenta o crescimento na direção normal em cada ponto. Figura adaptada da referência [1].

O processo de construção da equação de KPZ pode ser visto na figura 2.2. Supondo, inicialmente, a inclusão de uma partícula numa determinada posição, gerando, após um intervalo de tempo infinitesimal, um aumento ao longo do eixo das alturas. Temos, pelo teorema de Pitágoras que $(\delta h)^2 = (v\delta t)^2 + (X)^2$, em que X é o cateto oposto. Considerando $\nabla h = \tan \phi$, então pelo triângulo retângulo, $\tan \phi = \frac{X}{v\delta t} = \nabla h$, isto é, $X = v\delta t \nabla h$, de onde segue,

$$\begin{aligned} \delta h &= \left[(v\delta t)^2 + (v\delta t \nabla h)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= (v\delta t) \left[1 + (\nabla h)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \tag{2.55}$$

expansão em série de Taylor, temos:

$$\delta h = (v\delta t) \left[1 + \frac{1}{2} (\nabla h)^2 + \dots \right], \quad (2.56)$$

ou, ainda,

$$\frac{\delta h}{\delta t} = v + \frac{v}{2} (\nabla h)^2 + \dots, \quad (2.57)$$

Fazendo uso dos argumentos sobre simetria, descritos na Seção (2.5), podemos ter a presença de termos não lineares $(\nabla h)^{2k}$ na Eq. (2.16), porém o termo mais relevante é o de menor ordem, então:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v\nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \xi(\mathbf{x}, t), \quad (2.58)$$

onde λ corresponde ao termo não linear, sendo responsável pelo mecanismo de inclinação. O termo $\xi(\mathbf{x}, t)$ está associado às flutuações, com as propriedades (2.10) e (2.11).

A Eq. (2.58) é a equação de Kardar-Parisi-Zhang ou simplesmente equação de KPZ, uma equação diferencial estocástica não-linear que descreve o processo de crescimento em diversos sistemas que possuem os mesmos expoentes (α, β, z) ; isto é, pertencem a mesma classe de universalidade.

2.7.1 Expoentes de KPZ para $d = 1$

Considerando o método de escala, forma utilizada no processo da obtenção dos expoentes da equação de EW, foram feitas tentativas desse método na busca dos expoentes de KPZ. Esse método não se mostrou eficiente, tendo em vista que, usando as expressões (2.18) a (2.30) e os argumentos utilizados em EW, aplicados em KPZ, obtém-se

$$\frac{\partial h}{\partial t} = vb^{z-2}\nabla^2 h + \frac{\lambda}{2}b^{\alpha+z-2}(\nabla h)^2 + b^{-\alpha+\frac{z-d}{2}}\xi(\mathbf{x}, t). \quad (2.59)$$

A primeira observação que segue, diz respeito ao coeficiente do termo não linear,

que mostra

$$\alpha + z = 2, \quad (2.60)$$

denotada por Invariância Galileana (IG). No entanto, para o coeficiente do ruído em conjunto com (2.60), segue

$$\alpha = \frac{2-d}{3}. \quad (2.61)$$

A determinação do expoente de crescimento β é obtida a partir da expressão (1.8), com a combinação das expressões (2.60) e (2.61)

$$\beta = \frac{2-d}{4+d}. \quad (2.62)$$

No entanto, esses valores divergem do apresentado no trabalho original de KPZ [13], no qual os autores utilizaram o grupo de renormalização para encontrar os expoentes. A incongruência observada no método de escala ocorre porque os termos ν, λ e D da equação de crescimento não são renormalizados de forma independente, estando acoplados entre si, ou seja, os expoentes relacionadas a b não podem ser nulos. Dessa forma, para que haja a garantia da invariância de escala, os termos ν, λ e D da equação devem ser alterados no processo de reescalonamento. Kardar, Parisi e Zhang chegaram aos seguintes resultados:

$$\alpha = \frac{(2-d)^2}{2(3-2d)}, \quad (2.63)$$

$$\beta = \frac{(2-d)^2}{8-4d-d^2} \quad (2.64)$$

e

$$z = \frac{8-4d-d^2}{2(3-2d)}. \quad (2.65)$$

Portanto, para $d = 1$ os expoentes são:

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{1}{3}, \quad z = \frac{3}{2}.$$

No próximo Capítulo apresentaremos os autômatos celulares aplicados em modelos de crescimento, em particular DA, DB, Etching e SS.

Capítulo 3

Autômatos celulares e modelos de crescimento

A modelagem matemática representa uma área do conhecimento que estuda fenômenos e sistemas reais a partir da atuação por meio de equações diferenciais e de autômatos celulares. A atuação em fenômenos de crescimento encontra-se representada via equações diferenciais parciais estocásticas para os casos das equações de deposição aleatória, equações de EW e KPZ, apontada no Capítulo 2.

Neste Capítulo faremos a abordagem dos autômatos celulares aplicados em crescimento de superfícies, os quais, por definição, consistem em modelos computacionais que têm por causa e efeito o estudo de sistemas complexos em tempos aceitáveis e a um custo computacional relativamente baixo. Segundo Wolfram, todas as leis da natureza podem ser modeladas via autômatos celulares e por considerar sua simplicidade estes permitem análises detalhadas de fenômenos complexos, partindo da transformação em fenômenos simples [27, 28].

Considerando processos de modelagem via autômatos celulares, estes têm como características a presença de uma rede de células (ou sítios) e possuem estados que são alterados em tempos discretos e obedecem a regras específicas [27, 28, 157]. Destacaremos algumas propriedades importantes e comuns a todos os autômatos celulares[158]:

- **Homogeneidade:** as regras (ou *algoritmos*) são iguais para todas as células.

Essa propriedade caracteriza que, num autômato celular, especificamente para um modelo, submetido a uma regra específica, essa regra atua igualmente para todas as células (ou sítios) do modelo.

- **Estados discretos:** cada célula pode estar em um dos finitos estados.

Aqui diz respeito às condições iniciais das células nos autômatos celulares. Costuma-se dizer que os estados são 0 ou 1, vivo ou morto, preenchido ou não preenchido, depositado ou não depositado; ou regras similares.

- **Interações locais:** o estado de uma célula possui dependência com seus primeiros vizinhos.

Essa propriedade diz respeito ao estado das células vizinhas em relação à célula primária (no nosso caso, a célula escolhida e seus primeiros vizinhos).

- **Processo dinâmico:** a cada intervalo de tempo as células podem sofrer atualização de estado.

Para essa propriedade ocorre uma dependência imposta pelas regras que gerenciam os autômatos celulares, com o tempo discretizado.

Com as propriedades relatadas acima, é aceitável que os autômatos celulares possam ser iniciados de forma simples, aumentando o grau de complexidade à medida que as informações forem evoluindo.

Como relatado acima, ao considerar os elementos: estado, tempo e o espaço na forma discretizada, isso faz com que o sistema seja dividido em células ou sítios, que são seus elementos básicos. Assim, essas células ou sítios possuem um conjunto finito de estados pré-definidos e um conjunto de regras necessárias para a mudança de estados denotados por *algoritmos*. Os estados são alterados seguindo um conjunto das regras de transição. Tais regras de transição são baseadas no estado atual da célula e de suas vizinhanças. É válido ressaltar que os estados são alterados ao mesmo tempo para todas as células a partir das propriedades definidas.

3.1 Modelos de Crescimento

Após a apresentação, dentro da modelagem das equações diferenciais estocásticas de crescimento da Deposição Aleatória, das equações de EW e KPZ, apresentaremos, nas próximas seções modelos de crescimento via emprego de autômatos como o modelo de *Deposição Aleatória* (DA) [1], *Deposição Balística* (DB) [1, 30], *modelo de Etching* (corrosão) [31] e o *modelo Single Step* (SS) [30, 35, 36, 37, 38, 39, 40], sendo os três primeiros apresentados de maneira ilustrativa e, em seguida, de forma mais detalhada, o modelo SS, o qual será empregado em nossa investigação.

3.1.1 Deposição Aleatória (DA)

O modelo de deposição aleatória é considerado um dos mais simples da literatura, pois visto a olhos de autômatos celulares é detentor de regras fáceis de serem observadas e implementadas. No Capítulo 2 compreendemos sua simplicidade no momento em que é visto a partir de equação diferencial estocástica possuindo expoente a partir de regras estabelecidas pela própria equação [1]. A deposição aleatória representa a forma mais simples de crescimento e sua rugosidade $w(t) \sim t^{1/2}$ obtida analiticamente.

Num instante t um sítio $i \in V$, onde V é considerado o volume de um cubo num espaço de dimensão d , e escolhido de forma aleatória. Uma partícula passa a ser depositada, de tal maneira que, num instante posterior, sua altura $h(i, t)$ é aumentada em uma unidade sem que haja interferência de sítios vizinhos. O processo simplificado para enumeração do modelo de deposição aleatória é:

- 1) em um instante t , um sítio $i \in V$ é escolhido de forma aleatória;
- 2) então, $h(i + \Delta t) = h(i, t) + 1$.

A principal característica associada a esse modelo é a falta de mecanismos de correlação entre o sítio escolhido e seus vizinhos. Isso faz com que o sistema cresça

indefinidamente, não ocorrendo saturação. Na figura 3.1, é representado esquematicamente o modelo de DA. Pode-se ver que as partículas obedecem às regras impostas.

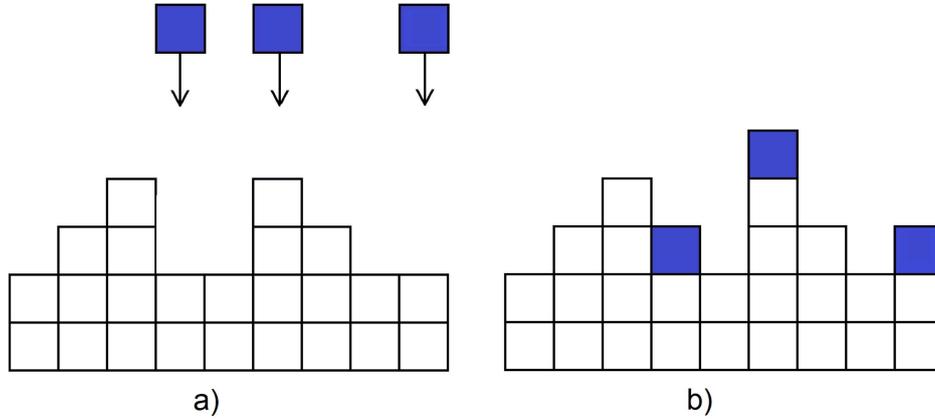


Figura 3.1: Esquema representativo do modelo de DA. Em a) é vista a aplicação da regra 1), a escolha aleatória dos sítios, e em b) a aplicação da regra 2). As partículas não interagem com os sítios vizinhos. Figura adaptada da referência [1].

Uma observação atribuída a esse modelo é a capacidade de ser modelado via equação diferencial estocástica e, dessa forma, ser resolvida analiticamente a partir das propriedades de suas flutuações, e este modelo, por não sofrer saturação, é possuidor apenas do expoente de rugosidade $\beta = \frac{1}{2}$. Como apresentado no Capítulo 2, esse modelo por si só corresponde a uma classe de universalidade.

3.1.2 Deposição Balística (DB)

O modelo de Deposição Balística (DB), proposto por M. Vold [159], foi utilizado para simular estruturas de sedimentos formadas na deposição de partículas em dispersão coloidal e, posteriormente, estudos se concentraram nas propriedades de agregados porosos gerados por esse modelo [1, 30, 160]. Nesse caso, as partículas são depositadas de forma aleatória e são fixadas ao primeiro sítio vizinho que encontra durante sua queda. Caso não encontre nenhum, adere à superfície do substrato.

Em termos de algoritmos, suas regras funcionam da seguinte maneira: num instante t , uma partícula é liberada em direção a uma posição aleatória $i \in V$, onde V

tem característica análoga ao da DA. A partícula, então, segue uma trajetória retilínea e vertical e possui condições de iterações do sítio escolhido com seus vizinhos, descrito sob uma e somente uma das condições: 1) se a partícula não encontrar vizinhos, ocorre a deposição sobre a superfície; 2) se na trajetória de percurso de queda, a partícula encontra um sítio vizinho ocupado, então ela adere lateralmente a esse sítio. Ver figura 3.2.

A forma simplificada do algoritmo da DB é então descrita pelas regras:

- 1) num instante t , uma partícula é depositada em direção a um sítio $i \in V$, escolhido de forma aleatória em um substrato;
- 2) após a deposição, a altura do sítio i passa a ser descrita pelo algoritmo, $h(i, t + \Delta t) = \max [h(i, t), h(i \pm 1, t)]$.

A representação dada pela figura 3.2 garante-nos uma visualização da DB e a aplicação de suas regras.

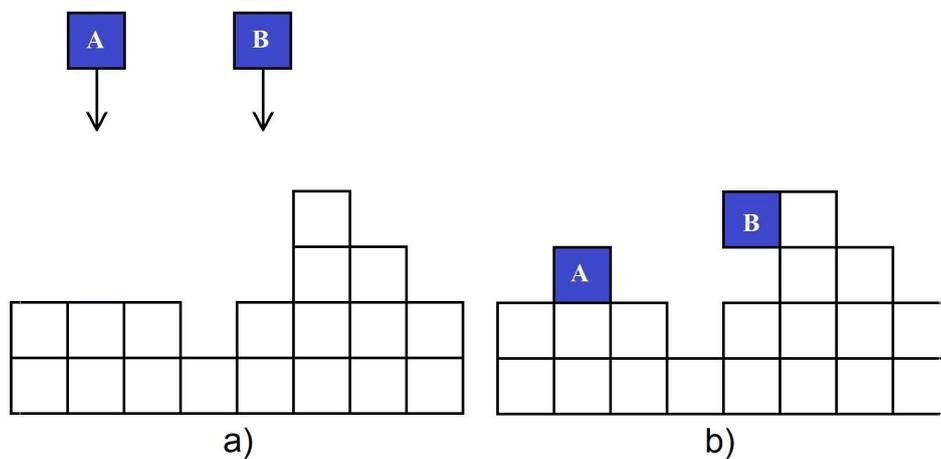


Figura 3.2: Esquema representativo do modelo DB com algumas deposições já realizadas. a) apresentação com aplicação da regra 1) escolha aleatória dos sítios onde as partículas deverão ser depositadas, A e B, aplicação da regra 1). Em b) são apresentadas as novas alturas descritas a partir da regra 2). Figura adaptada da referência [1].

Para o modelo de DB é observada a presença de espaços vazios devido ao algoritmo, regra 2). Essa característica faz com que haja correlação entre as partículas

depositadas e os sítios escolhidos e vizinhos. Em virtude dessa correlação, a rugosidade cresce linearmente com o tempo até atingir a rugosidade de saturação w_{sat} . Uma outra característica é que no modelo DB há um crescimento lateral o que altera as propriedades de escala e, portanto, os expoentes. Para o modelo DB, estudos envolvendo simulação fornecem como expoentes: $\alpha = 0.499(4)$ e $\beta = 0.336(4)$ [161], que são valores muito próximos aos de KPZ. Com isso, podemos afirmar que o modelo DB pertence à classe de universalidade de KPZ.

3.1.3 Modelo de *Etching*

Apresentaremos agora o modelo de *Etching*, proposto em 2001 por Mello e colaboradores [31]. Esse modelo tem como objetivo a descrição do processo de dissolução de um sólido cristalino quando posto sob ação de um fluido corrosivo. Por tradução literal da palavra “Etching”(gravura, corrosão), o modelo se faz presente em várias situações e por isso tem recebido bastante atenção [7, 26, 42, 70, 162, 163, 164].

O modelo de *Etching* apresenta, pelas regras de autômato celular, a simulação do processo corrosivo de uma superfície quando em contato com um fluido. Por simplificação, consideraremos os mesmos conceitos definidos para os modelos anteriores, acrescentando uma nova regra. Textualmente é escolhido um sítio i em V , com V o volume de um cubo d -dimensional e com certa altura $h(i, t)$. Deixa-se cair uma partícula no sítio i e, se as alturas dos sítios vizinhos forem maior que a altura do sítio escolhido, a altura desses vizinhos se igualam ao do sítio escolhido, enquanto que a altura do sítio escolhido diminui em uma unidade. A forma resumida para o modelo pode ser escrito como:

- 1) no instante t um sítio $i \in V$ é escolhido aleatoriamente;
- 2) se $h(i \pm 1, t) > h(i, t)$, então $h(i \pm 1, t + \Delta t) = h(i, t)$;
- 3) e por fim, $h(i, t + \Delta t) = h(i, t) - 1$.

Apresentamos, na figura 3.3, a representação esquematizada do modelo em $(1 + 1)$ dimensão e a implementação das regras em alguns sítios.

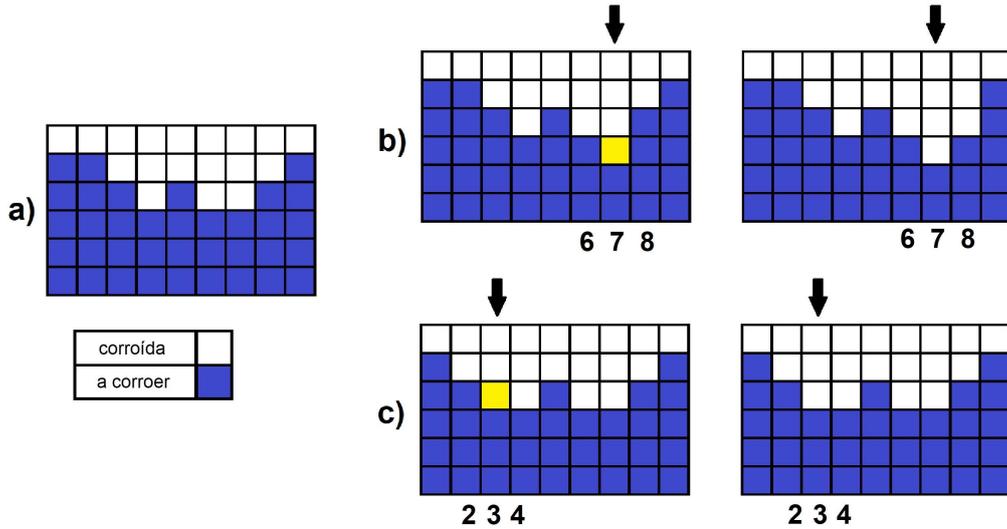


Figura 3.3: Representação ilustrativa do modelo de *Etching* em (1 + 1) dimensão. Figura a) representação do modelo com algumas configurações estabelecidas. Figuras b) e c) representando o modelo com implementação das regras 1) regra de escolha e 2) e 3) regras de seleção. Fonte própria.

Silva, em 2021, investigou a precisão dos expoentes obtidos por diferentes métodos para modelos de crescimentos distintos em (1 + 1). No caso particular do modelo de Etching, os valores obtidos foram $\alpha = 0,50464(3)$, obtido por função de correlação e os expoentes $\beta = 0,33955(9)$ e $z = 1.500$, obtidos pela equação universal de rugosidade [9].

Acrescenta-se ainda que o referido modelo não só serviu como ainda serve de base explorativa para uma gama variada de trabalhos, nos quais podem ser encontrados outros expoentes, com os valores muito próximos aos aqui apresentados, o que faz com que o modelo pertença à classe de universalidade de KPZ, e passa por outras explorações intrigantes de modelos de crescimento[8, 25, 42, 46, 70, 162, 163, 165, 166, 167, 168, 169], aqui, são apenas alguns artigos que revelam a importância do modelo de Etching.

Acrescenta-se, ainda, que o modelo, não só serviu como ainda serve de base explorativa para uma gama variada de trabalhos, permitindo encontrar expoentes mais precisos, mas também servindo de alicerce a outros sistemas de crescimentos. Tendo em vista sua importância e aplicabilidade, destacamos alguns textos que o caracterizam [8, 25, 42, 46, 70, 162, 163, 165, 166, 167, 168, 169].

3.1.4 Modelo *Single-Step* (SS)

Descreveremos nesta seção o modelo *Single-Step* (SS) [1, 7, 30, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 170], que tem grande destaque na literatura, por apresentar conexões com outros modelos, tais como, o modelo de *Ising* [30, 170, 171], o *Totally asymmetric simple exclusion process* (TASEP) (Processo de exclusão simples totalmente assimétrico) [45, 172] e o modelo de *Six-Vertex* (seis vértices) [30, 44, 173]. Outro destaque associado a esse modelo é a capacidade de seus expoentes transitarem entre as classes de universalidade de EW e KPZ, como veremos mais adiante.

Definimos o modelo SS considerando o substrato inicial diferentes de outros modelos de crescimento como DA, DB, DARS e Etching, de forma que a condição inicial para SS em $(1 + 1)$ dimensão tenha o formato de serra dentada. Em termos matemáticos, sua estrutura inicial é apresentada de maneira que, para os sítios de índices ímpar, a altura vale $h(2i - 1, 0) = 0$ e sítios de índices pares $h(2i, 0) = 1$. A partir dessa estruturação a configuração inicial para o modelo SS em $(1 + 1)$ dimensão é dada por

$$h(i, 0) = \frac{1 + (-1)^i}{2}. \quad (3.1)$$

Para o modelo SS em $(2 + 1)$ dimensões, as regras iniciais do autômato celular são similares ao modelo SS em $(1 + 1)$ dimensão, com a configuração descrita a seguir: se $i + j$ for par, então $h(i, j; 0) = 0$, e se $i + j$ for ímpar então, $h(i, j; 0) = 1$, o que define, como regra geral para o modelo SS em $(2 + 1)$ dimensão, a expressão

$$h(i, j; 0) = \frac{1 + (-1)^{i+j}}{2}. \quad (3.2)$$

A representação esquematizada do modelo SS é apresentada na figura 3.4 a) para $(1 + 1)$ dimensão e na figura 3.4 b) para $(2 + 1)$ dimensão.

Seguindo as condições iniciais do modelo SS, o processo de crescimento é definido por regras em que, inicialmente, escolhido de forma aleatória um sítio i , a altura do depósito nesse sítio $h(i, t)$ deve sempre divergir dos sítios vizinhos, $h(i \pm 1, t)$, de

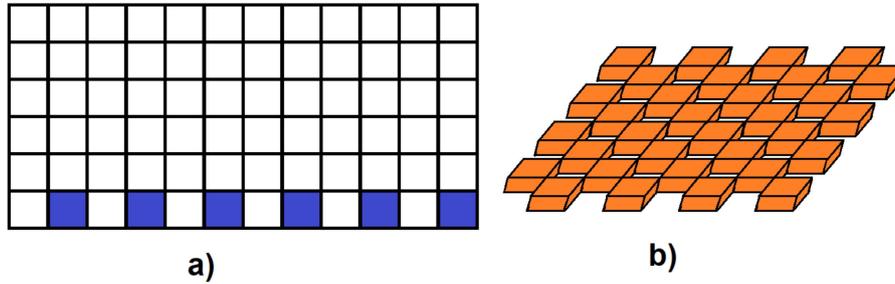


Figura 3.4: Representação ilustrativa do modelo Single Step (SS) com as condições iniciais, em a) representação do modelo SS em (1 + 1) dimensão, e em b) modelo SS (2 + 1) dimensão.

maneira que

$$|\eta| = |h(i, t) - h(i \pm 1, t)| = 1, \quad (3.3)$$

onde η é chamado de diferença de altura entre dois primeiros sítios vizinhos e, por construção, segue que $\eta = \pm 1$. Essa propriedade caracteriza facilmente sua associação com o modelo de Ising [170], tendendo facilitar os processos de manipulações via simulação. Ao observarmos as condições iniciais, é visto que o tamanho do substrato seja par, isto é, deve-se ter $1 \leq (i, j) \leq L$, com L par, tem-se facilmente averiguadas as condições de contorno periódicas.

Partindo das condições impostas, o processo de crescimento da interface deve seguir as seguintes regras: inicialmente, uma partícula de altura igual a dois deverá ser adicionada a um sítio i , selecionado aleatoriamente, ver figura 3.5 a), a qual deverá cumprir a condição (3.3), sendo rejeitada em caso contrário, figura 3.5 b). Caso o sítio escolhido seja um mínimo local, então a altura $h(i, t)$ aumenta em 2 com probabilidade p . Se o sítio for um máximo local, então a altura $h(i, t)$ diminui em 2 com probabilidade q e, considerando a teoria de probabilidade, admitimos que $p + q = 1$.

Com as condições descritas, o modelo SS com as regras (3.1) e (3.3) tem seu algoritmo melhor definido como segue. Considere um hipercubo de aresta L e volume $V = L^d$, imerso em um espaço d -dimensional, segue:

- 1) em um instante t , é escolhido de forma aleatória um sítio $i \in V$;
- 2) se $h(i, t)$ é um mínimo local, então $h(i, t + \Delta t) = h(i, t) + 2$, com probabilidade

p ;

- 3) se $h(i, t)$ é um máximo local, então $h(i, t + \Delta t) = h(i, t) - 2$, com probabilidade $q = 1 - p$.

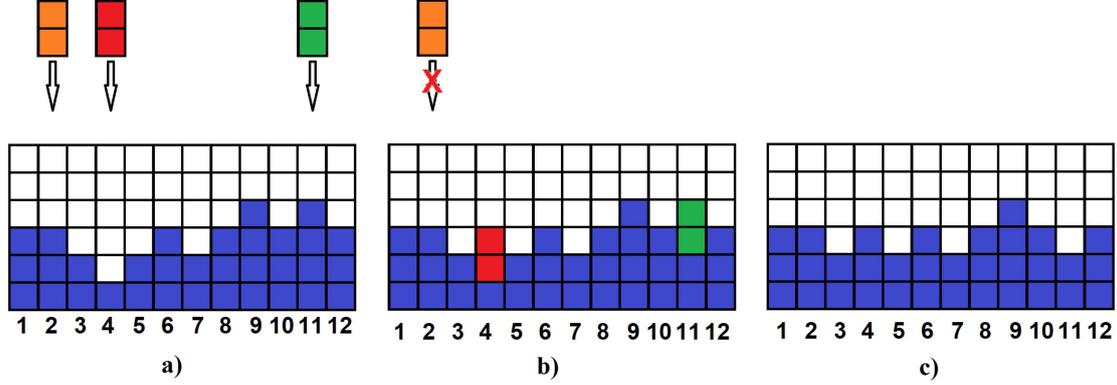


Figura 3.5: Representação ilustrativa do modelo SS em dimensão $(1 + 1)$. Figura a) representação com algumas configurações efetivadas e outras ainda a serem efetivas e com sítios escolhidos (laranja, vermelho e verde), presença da regra 1) regra da escolha. Figura b) efetivação das possíveis configurações, obedecendo às regras: 2) (vermelho) e 3) (verde) respectivamente, a partícula (laranja) é recusada por não assumir nenhuma das regras. Figura c) representação das novas posições a partir das configurações.

Considerando as regras e especificidades do modelo SS, e partindo da expressão (3.3), vale pontuar que alterar o valor da probabilidade p , corresponde alterar o valor do coeficiente de inclinação λ na equação de KPZ, em particular, o resultado exato para o coeficiente de inclinação λ , na equação de KPZ para o modelo SS [1, 35, 170], é dado pela expressão:

$$\lambda = p - q, \quad (3.4)$$

logo, ao fazer $p = q$, então $\lambda = 0$, e o modelo SS pertence a classe de universalidade de EW, o que é válido quando, $p = q = \frac{1}{2}$, e é KPZ para os casos em que $p \neq q$.

Apresentamos, na figura 3.6 a), as curvas de crescimento em função do tempo para o modelo SS em $(1 + 1)$ dimensão. Os dados das simulações são substratos de tamanhos $L = 2^n$ e $n = 6, 7, 8, 9, 10$ e 11 , quando foram realizados uma média de 10^4 experimentos e probabilidade $p = 1$. Em (3.6 b)) empregamos os dados obtidos e fizemos os ajustes de forma que nos permitiu para valor $\alpha = 0.49(3)$. O expoente

de crescimento é conseguido a partir do ajuste de $L = 2^{10}$, que forneceu $\beta = 0.31$ (9) e, para o expoente dinâmico, fez-se uso da relação universal $z = 1,5806$, que condiz com os resultados de KPZ.

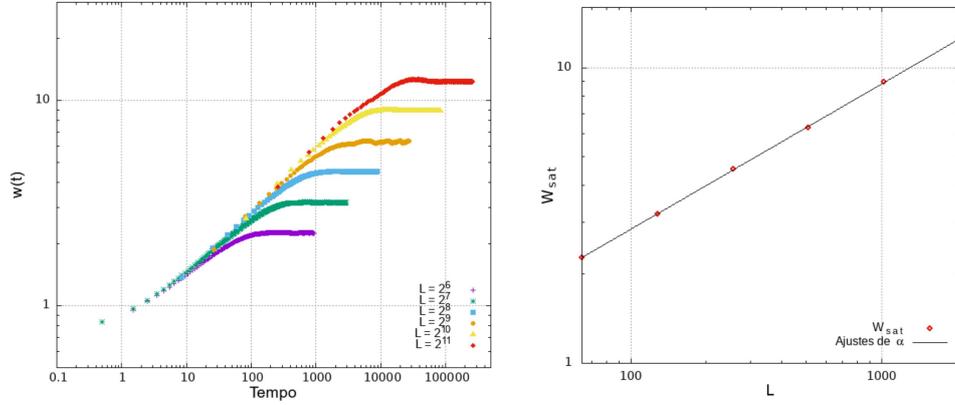


Figura 3.6: Figura a) Curvas de crescimento $w(t) \times t$, na escala $\log \times \log$ para o modelo SS em $(1 + 1)$ dimensão. Figura b) Ajuste das rugosidades de saturação em função de L .

No Capítulo a seguir apresentaremos nossos resultados, tomando como elemento principal o modelo SS em $(2 + 1)$ dimensões em conjunto com suas propriedades e características aqui apresentadas.

Capítulo 4

Resultados

Apresentaremos, neste Capítulo, os nossos resultados, onde investigamos as implicações da dimensão fractal d_f , da superfície no teorema de flutuação-dissipação associado à classe de universalidade de KPZ [21], a investigação a ser realizada tem como elemento de entrada simulações computacionais do modelo SS em $(2 + 1)$ dimensões. É conveniente ressaltar que os resultados deste trabalho culminaram na publicação *The Fractal Geometry of Growth: Fluctuation–Dissipation Theorem and Hidden Symmetry*, *Frontiers in Physics* [doi: doi: 10.3389/fphy.2021.741590].

Cabe relebrar que a equação de KPZ, Eq. (2.58), e o ruído possui as propriedades (2.10) e (2.11) as quais repetiremos por questões de simplicidade:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \xi(\mathbf{x}, t), \quad (4.1)$$

onde $\langle \xi(\mathbf{x}, t) \rangle = 0$, e

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (4.2)$$

lembrando que o coeficiente D representa a intensidade do ruído aplicado e d a dimensão espacial em que o sistema se encontra.

Em artigo recente, foi mostrado que nos processos estocásticos com a participação do ruído, o TFD torna-se uma ferramenta primordial no sentido de fornecer

respostas simples aos estudos dos processos aí estabelecidos. Porém vale afirmar que em muitas situações não estejamos fazendo referência direta ao próprio TFD, mas uma variante do teorema que possui propriedades semelhante ao TFD presentes em fenômenos difusivos. Acrescentamos que associado a essa nova variante do TFD, não se trata especificamente de um novo TFD, mas sim da intensidade do ruído aplicado aos sistemas. Essa intensidade do ruído aplicado é apresentada em sistemas de crescimento quando observado o crescimento com o ruído correlacionado, o que significa dizer que deve existir uma nova forma semelhante ao TFD para esses casos, como apresentado em [39]. Aqui faremos uma abordagem semelhante usando o modelo *Single-Step* (SS) em $(2 + 1)$ dimensões.

Nesse contexto pertinente a investigação da relação entre a dimensão fractal e o ruído, o modelo SS mostra-se mais adequado, pois podemos alterar a classe de universalidade alterando o parâmetro da probabilidade p , uma vez que o termo não linear da Eq. (4.1) é dado por: $\lambda = p - q$. Desse modo, quando $p = q$, então $\lambda = 0$, e o modelo SS pertence à classe de universalidade de EW, o que é válido para o caso em que $p = q = \frac{1}{2}$. Por outro lado quando $p \neq q$ temos KPZ [41].

Além disso, como apresentado no Capítulo anterior, os modelos de crescimento, são autômatos celulares, definidos por regras. A regra 1), comum a todos modelos de crescimento, indica a escolha aleatória de um sítio (por exemplo, local de deposição/dessorção). Essa regra é essencialmente referida ao ruído branco (ruído aplicado) associado às equações de crescimento, denotaremos essa regra, por regra da escolha. As demais regras determinam, de maneira particular, a dinâmica evolutiva nos modelos de crescimento sendo responsáveis pelos critérios de seleção (por exemplo, se haverá ou não deposição).

Nesse sentido, tomando como referência o efeito da regra 1), regra da escolha, para modelos de crescimento, é observado que, para tempos curtos, não aparece conexão entre o sítio escolhido e seus vizinhos, de forma que a rugosidade é dada por $w(t) \sim t^{\frac{1}{2}}$ [26]. Esse mesmo argumento também pode ser presenciado em outros modelos de crescimento que obedecem a mesma regra. Destacamos que nosso interesse

é o processo investigativo do ruído e, para esse acontecimento, devemos considerar as correlações entre os sítios, descritas a partir das regras de seleção, que no caso do modelo SS são apresentadas pelas regras 2) e 3). 3.

4.1 Relação geometria fractal e TFD

Então, para observar se há relação entre a intensidade do ruído aplicado D e a geometria fractal da superfície, deve ser implementada uma função que a partir das regras de seleção, regras 2) e 3) do modelo SS, retorne o ruído efetivamente utilizado, aqui denotado por intensidade do ruído efetivo D_{eff} . Para esse feito, tomemos o modelo SS em $(2 + 1)$ dimensão, com as seguintes configurações: tamanho do substrato $L = 2^{10} \times 2^{10}$, com condições de contorno periódica, probabilidade $p = 1$, que implica em $\lambda = 1$, o que pela expressão (3.4) faz com que o modelo seja KPZ, e um total de 10^4 experimentos.

Apresentamos na figura 4.1, o gráfico, $D \times t$, representado a evolução da intensidade do ruído aplicado em função do tempo, na curva superior (vermelho) temos a representação da intensidade do ruído aplicado com valor médio quadrático igual a 1. Essa linha representa a intensidade do ruído sem a presença das regras 2) e 3), somente a presença da regra 1), é utilizada $D(t) = 1$. A curva inferior (verde), representa a intensidade do ruído que realmente é aproveitada pelo modelo SS, a intensidade do ruído efetivo D_{eff} . Esse ruído aparece após a passagem imposta pelas regras 2) e 3) do modelo SS. Na figura menor, figura 4.1, é apresentada que a intensidade efetiva do ruído diminui muito rapidamente tendendo a um valor constante.

É observado ainda que essas intensidades possuem relação com a fractalidade da superfície, e a diminuição de sua intensidade obedece à dinâmica do modelo, de tal maneira que a intensidade do ruído tende a se estabilizar a medida em que o sistema tende a saturação, $w(t) \rightarrow w_{sat}$.

Na figura 4.2 maior, é apresentado o comportamento das intensidades do ruído efetivo D_{eff} em função das probabilidades, sendo D_{eff} obtido como uma média no tempo (no regime estacionário), para os valores de D entre $2 < t < 3$. A curva

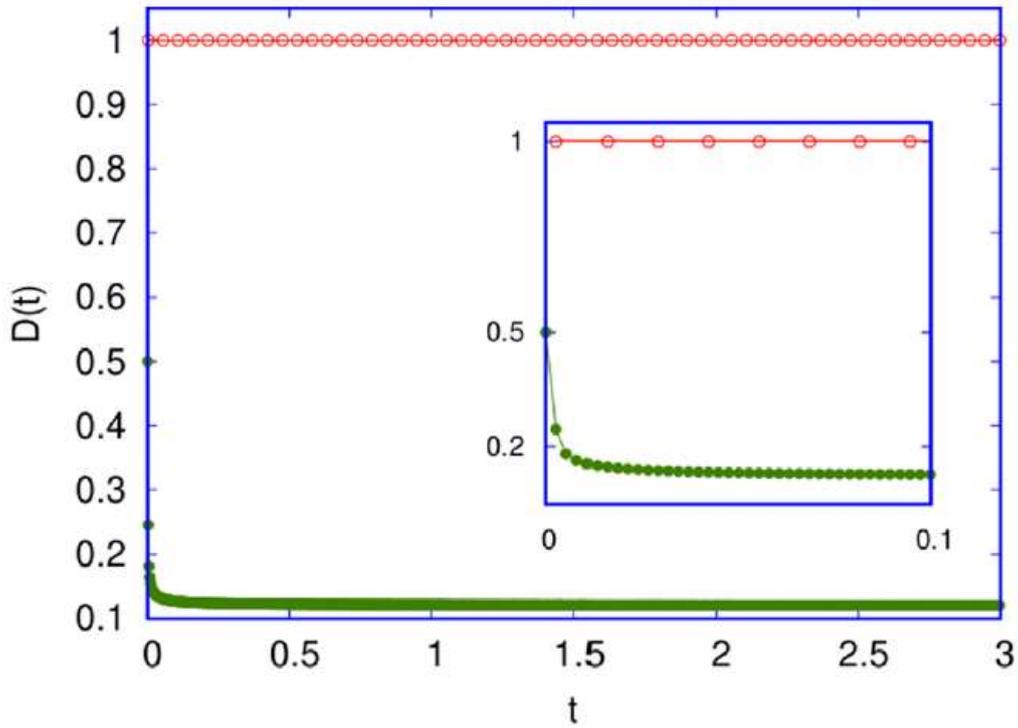


Figura 4.1: Intensidade do ruído em função do tempo, para o modelo SS em $(2 + 1)$ dimensão. A curva superior (vermelho) representa o ruído aplicado, sem a presença das regras 2) e 3), enquanto que a curva inferior (verde) representa o ruído efetivo, isto é, o ruído resultante após a passagem pelas regras 2) e 3).

contínua corresponde à função, $f(p)$ que, embora não tenha uma prova analítica, ela consegue um bom ajuste dos dados

$$f(p) = c_1 - c_2(p - q)^\varphi, \quad (4.3)$$

sendo as constantes c_1 e c_2 elementos ajustáveis, e φ é a razão áurea $(\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2})$, que é o valor exato do expoente z em $(2 + 1)$ dimensão, como apresentado no trabalho de Gomes-filho e colaboradores [21], e que abordaremos adiante. São apresentados na figura 4.2 (figura menor) os casos da D_{eff} em função de λ^2 , tomando $\lambda \equiv \frac{\lambda}{\lambda_{max}}$, a curva crescente (pontos em verde) é correspondente ao modelo SS em $(1 + 1)$ dimensão, com

$$D_{eff}(\lambda) = D_{EW}^{(1)}(1 + \lambda^2), \quad (4.4)$$

onde $\lambda = p - q$. Já a curva decrescente (pontos em vermelho) correspondente ao

modelo SS em $(2 + 1)$ dimensão, com

$$D_{eff}(\lambda) = D_{EW}^{(2)} + c_3\lambda^2 \quad (4.5)$$

onde $\lambda = (p - q)^{\frac{\varphi}{2}}$, c_i com $i = 1, 2, 3$ são constantes ajustáveis e $D_{EW}^{(d)}$ constantes ajustáveis, sendo $d = 1, 2$ as dimensões.

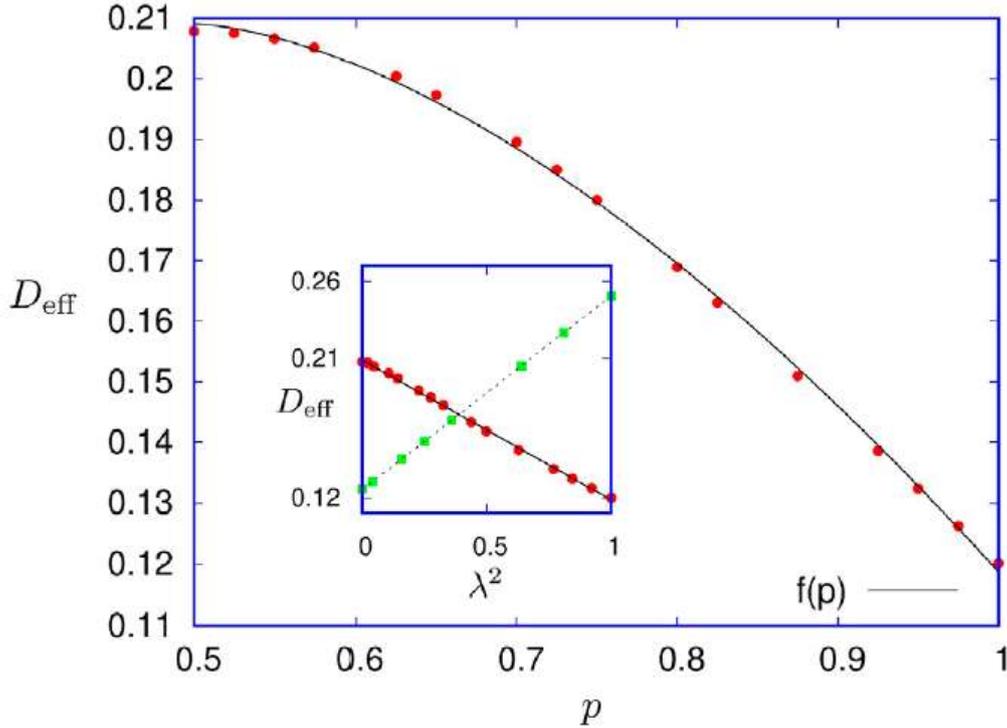


Figura 4.2: Intensidade efetiva do ruído, D_{eff} , em função da probabilidade p para o modelo SS em $(2 + 1)$ dimensão. A curva contínua corresponde à função $f(p) = c_1 - c_2(p - q)^\varphi$, c_1 e c_2 constantes ajustáveis e φ razão áurea. Na inserção tem-se D_{eff} em função de λ^2 . Os pontos em verde são para SS em $(1 + 1)$ dimensão e os pontos em vermelho referem-se aos resultados em $(2 + 1)$ dimensão.

Tomando $f(p)$, como a função de ajuste dos dados para o modelo SS em $(2 + 1)$ dimensões, é previsto que essa função fornece elemento de ligação da geometria fractal da superfície através da dimensão fractal, $d_f = \varphi$. Sendo portanto a função do nosso interesse.

Considerando agora o trabalho de Krug e colaboradores[40], de onde se destaca a apresentação exata da rugosidade de saturação para o modelo SS em $(1 + 1)$ dimensão

e fazendo uso da expressão obtemos uma forma generalizada

$$w_{sat} = \left(\frac{D_{eff}}{bv\Phi} L \right)^\alpha, \quad (4.6)$$

então,

$$D_{eff} = \frac{b\Phi}{L} v w_{sat}^{\frac{1}{\alpha}}, \quad (4.7)$$

substituindo D_{eff} na expressão (4.2) e considerando a dependência da superfície fractal, apresentamos como o ruído é alterado no decurso de sua dinâmica de crescimento:

$$\begin{aligned} \langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle &= 2cv (w_{sat})^{\frac{1}{\alpha}} \delta^{d_f}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') \\ &= 2D_{eff} \delta^{d_f}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde $c = \frac{b\Phi}{L}$. Ressaltamos que a definição da função delta fracionária pode ser encontrada em [174, 175].

Uma análise para $(1 + 1)$ dimensão, tem-se $\alpha = \frac{1}{2}$, e a Eq. (4.8) volta a ser a Eq. (4.2). Para os casos em $d > 1$, α e d_f é dado por (4.13) para $d = 2$ [21]. O parâmetro Φ é uma grandeza adimensional, definida por

$$\Phi = \left(\frac{D_{eff}}{v} \right)^{\frac{\varepsilon}{d_f}} \left(\frac{\lambda}{v} \right)^\varepsilon \quad (4.9)$$

de onde se vê que, tomando $\varepsilon = 0$ para $d = 1$, tem-se $\Phi = 1$ e um número próximo de zero para altas dimensões ($\varepsilon \approx 0$). Para modelos em $(d + 1)$ dimensões, com $d = 2$, como o modelo de Etching, tem-se $\Phi = 1.00(2)$ [21], enquanto para outros modelos, o valor de Φ é da ordem da unidade.

A Eq. (4.8) determina, de forma exata, o resultado para $d = 1$, fazendo com que esse novo TFD volte a ser a expressão (4.2). Acrescenta-se que esse novo TFD é fornecido para cada equação de crescimento e o expoente α muda com a dimensão, enquanto que, na sua forma geral, o TFD na equação de Langevin [25, 147] independe da dimensão.

Por fim, apresentamos na figura 4.3, uma analogia que estabelece a participação

do ruído aplicado e do ruído efetivo, quando ocorre a passagem do ruído aplicado pelas regras de seleção, regras 1) e 2). Observe que a superfície fractal do filme fino [2], assim como o retificador [176], agem como um filtro seletivo. No caso, de crescimento o ruído aplicado $\xi(x, t)$, equação (4.2), se transforma no ruído efetivo $\eta(x, t)$, equação (4.8).

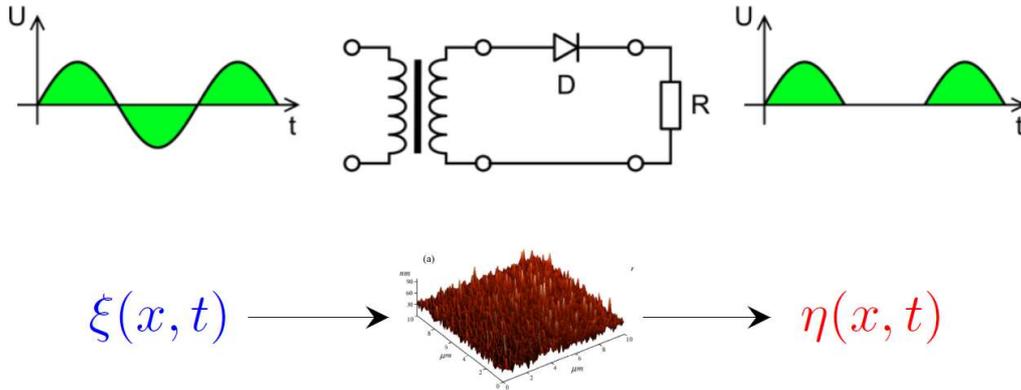


Figura 4.3: Figura superior: representação de um retificador de meia onda, mostrando o sinal de entrada e o sinal de saída após a passagem pelo retificador [176]. Na figura inferior, temos a representação comparativa do modelo de crescimento, com o ruído aplicado e que, após a passagem impostas pelas regras de seleção, retorna o ruído efetivo. Nessa representação esquemática usamos a figura da morfologia do filme fino de telureto de cádmio [2].

Na próxima Seção, abordaremos os expoentes KPZ para $d > 1$, descrito por Gomes-filho e colaboradores [21], essa abordagem tem como objetivo apresentar os expoentes e mostrar a participação da dimensão fractal como novo expoente do conjunto dos expoentes da classe de universalidade de KPZ. É visto ainda que a presença de um expoente determinam os demais, o que faz com que restringimos a busca pelo expoente de rugosidade.

4.2 Expoentes de KPZ para $d > 1$

Apresentaremos, de maneira resumida, a caracterização que expõe os expoentes de KPZ descrito por Gomes-filho e colaboradores, que diz respeito aos expoentes da equação KPZ em $(d + 1)$ dimensões. Considerando o elo devido à invariância galileana (2.60) e à relação universal (1.8), sabe-se que a partir da presença de um

expoente os demais são facilmente obtidos. Considerando que a busca de um expoente, o emprego de métodos analíticos tais como método de escala e grupo de renormalização foram utilizados, obtendo êxito apenas nos casos $d = 1$, e para casos em que $d > 1$ muitos esforços têm sido empregados.

É visto que na busca por expoentes da equação KPZ, a aplicação de métodos analíticos como, método de escala e grupo de renormalização foram empregados, de onde podemos observar que o uso do método de escala fornece a IG, mas na abordagem das dimensões este não produziu resultados satisfatórios. Fazendo uso do grupo de renormalização, notavelmente este fornece a IG, bem como os expoentes exatos para $(1 + 1)$ dimensão, não sendo verdadeiro para casos em que $d > 1$ [13]. Devemos mencionar que a busca pela determinação dos expoentes da equação KPZ, para $d > 1$, tem sido alvo de muito esforço e emprego de métodos e teorias. Assim, devemos considerar que muitos resultados foram obtidos e outros melhorados, como podem ser vistos a partir dos trabalhos de [2, 6, 21, 25, 26, 37, 39, 41, 70, 162, 171, 177] , definindo novas perspectivas para um número maior de avanços na área de fenômenos de crescimentos.

Considerando ferramentas já existentes, Gomes-filho e colaboradores [21], partindo de resultados obtidos a partir da aplicação dos métodos descritos e apresentando novas possibilidades, conseguiram a obtenção dos expoentes para KPZ em $(2 + 1)$ dimensões e ainda propuseram uma nova maneira de obtenção dos expoentes de KPZ em $(d + 1)$ dimensões, com $d > 2$.

Nesse contexto, os elementos essenciais que permitiram os autores encontrar os expoentes de KPZ de forma analítica são:

1. análise dimensional: a aplicação da análise dimensional consiste numa ferramenta com objetivo de possibilitar a previsão, inspeção e adaptação das unidades físicas utilizadas para a resolução de equações. Essa ferramenta pode ser combinada de forma aceitável com o método de escala;
2. dimensão fractal: a inserção da dimensão fractal da superfície - d_f como um novo elemento;

3. correção do TFD: uma correção no TFD faz-se necessária, tendo em vista que para dimensões maiores que 1, a rugosidade estará de alguma maneira associada com a dimensão fractal, sendo esse entendimento a nossa contribuição [25].

Dessa forma, considerando a relação existente entre o expoente de rugosidade α e a dimensão fractal d_f [1, 178], e definindo como dimensão inteira do espaço $\tilde{D} = d + 1$, enquanto que a fractalidade da superfície é dada por $\tilde{D}_i = d_f + 1$, segue que [21]

$$\alpha = \tilde{D} - \tilde{D}_i = d - d_f, \quad (4.10)$$

como $0 < \alpha < 1$, então $d - 1 \leq d_f \leq d$, que é o esperado para a dimensão fractal inserida em espaço inteiro. Por exemplo, para $d = 2$, recuperamos o resultado clássico $\alpha = 2 - d_f$ [1, 178]. Além disso, a dimensão fractal fica limitada a $1 \leq d_f \leq 2$. A ideia que uma superfície rugosa é fractal fica clara na figura 4.4.

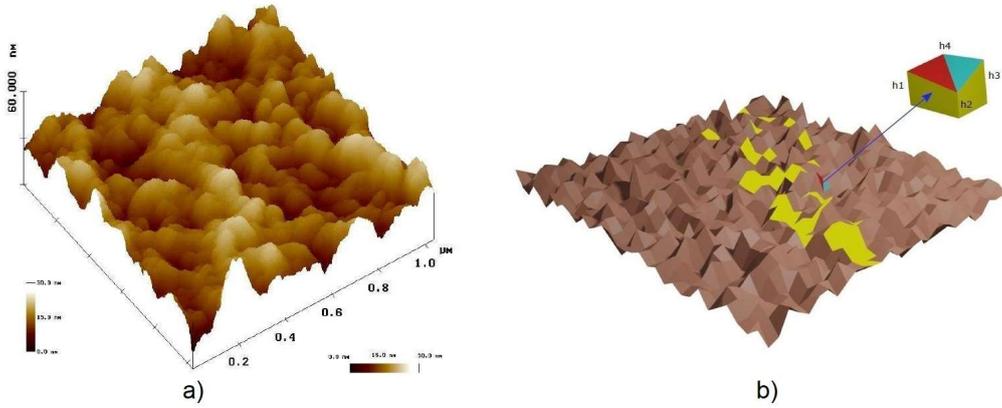


Figura 4.4: a) Superfície irregular ou rugosa, apresentando escalonamento fractal com dimensão d_f entre $1 \leq d_f \leq 2$. Figura adaptada de [179]. b) Geometria fractal da superfície (2 + 1) dimensões. Em destaque uma célula unitária usada para o cálculo da d_f , onde o tamanho total da superfície S_T é dado por $S_T \propto \Delta l^{d_f-d}$ e $\Delta x = \Delta y = \Delta l$. Fonte:[21].

Dessa maneira, impondo a dimensão fractal da superfície e fazendo a análise dimensional na equação de KPZ (2.58), os autores chegaram em [21]:

$$\alpha = \frac{1}{d_f + 1}, \quad (4.11)$$

que, em conjunto com a equação (4.10), fornece os expoentes de forma exata:

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{d+1-\sqrt{\Delta}}{2}, & d_f &= \frac{d-1+\sqrt{\Delta}}{2} \\ z &= \frac{3-d+\sqrt{\Delta}}{2}, & \beta &= \frac{d-\sqrt{\Delta}}{3-2d}\end{aligned}\tag{4.12}$$

com $\Delta = (d + 1)^2 - 4$. Desse modo, os expoentes de KPZ em $(2 + 1)$ dimensão, são:

$$\alpha = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} = 0,381966,\tag{4.13}$$

$$\beta = \sqrt{5} - 2 = 0,236067\tag{4.14}$$

e

$$z = d_f = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 1,61803,\tag{4.15}$$

As relações (4.12) fornecem a partir de agora um novo conjunto de expoentes, (α, β, z, d_f) para $d > 1$, mostrando que não existe um limite crítico superior para a equação KPZ, uma vez que o expoente de rugosidade α e de crescimento β decaem com a dimensão d , enquanto que o expoente dinâmico z , devido a IG, tende a se aproximar de 2, e a d_f tende a se aproximar da dimensão inteira, sem mostrar qualquer dimensão crítica superior específica.

Capítulo 5

Conclusões

Considerando os fenômenos de crescimento e evidenciando a importância do estudo de tais fenômenos tanto do ponto de vista teórico como experimental, a realização deste trabalho constou, inicialmente, de uma exposição dos conceitos básicos próprios aos fenômenos de crescimento, seguida da apresentação das equações de crescimento, destacando as equações de Edwards-Wilkinson e de Kardar-Parisi-Zhang, bem como seus expoentes o que descreve suas classes de universalidade. Fizemos ainda uma exploração de autômatos celulares com exemplificações dos modelos de *Deposição Aleatória*, *Deposição Balística*, modelo de *Etching* e modelo de *Single-Step*, sendo o último utilizado na investigação de nosso trabalho.

Investigamos, a partir do modelo SS em $(2 + 1)$ dimensão, as implicações da dimensão fractal d_f , da superfície no TFD associado à classe de universalidade de KPZ; e mostramos que, à medida que o sistema evolui no tempo, nem todos os sítios são selecionados, devido às regras do modelo (regras de seleção), resultando na presença de um ruído efetivo. Mostramos que a intensidade do ruído aplicado D , é alterada na medida em que a rugosidade da interface evolui no tempo, gerando, por sua vez, um valor constante no regime estacionário (intensidade do ruído efetivo D_{eff}), e o mesmo associado à dimensão fractal da interface. Essa análise mostrou por que a associação entre a dimensão fractal e o expoente de rugosidade está correta, como investigada por Gomes-Filho e colaboradores [21, 39].

Ressaltamos que os resultados aqui obtidos resultaram no trabalho, *The Frac-*

tal Geometry of Growth: Fluctuation-Dissipation Theorem and Hidden Symmetry, Frontiers in Physics [25].

Destaco como perspectiva de futuros trabalhos a busca por novos métodos a que se destina o cálculo da dimensão fractal nas interfaces de crescimento.

Referências Bibliográficas

- [1] BARABÁSI, A.-L.; STANLEY, H. E. et al. *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge university press, 1995.
- [2] ALMEIDA, R.; FERREIRA, S.; OLIVEIRA, T.; REIS, F. A. Universal fluctuations in the growth of semiconductor thin films. *Physical Review B*, v. 89, n. 4, p. 045309, 2014.
- [3] ANDRADE, H. R. D. C. S. *Estudo de filmes finos nanocompósitos de titanato de bário/ferrita de cobalto produzidos pelo processo sol-gel*. 2012. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, 2012.
- [4] FUJIKAWA, H.; MATSUSHITA, M. Fractal growth of bacillus subtilis on agar plates. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 58, n. 11, p. 3875–3878, 1989.
- [5] MERIKOSKI, J.; MAUNUKSELA, J.; MYLLYS, M.; TIMONEN, J.; ALAVA, M. J. Temporal and spatial persistence of combustion fronts in paper. *Physical review letters*, v. 90, n. 2, p. 024501, Jan 2003.
- [6] OJEDA, F.; CUERNO, R.; SALVAREZZA, R.; VÁZQUEZ, L. Dynamics of rough interfaces in chemical vapor deposition: experiments and a model for silica films. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 84, n. 14, p. 3125, 2000.

- [7] CARRASCO, I. S. D. S. *Efeitos das condições iniciais na dinâmica de crescimento de interfaces*. 2018. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa - MG, 2018.
- [8] GOMES, W. R. J. *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, 2020.
- [9] SILVA, G. A. D. *Dinâmica da interface em modelos de crescimento unidimensionais*. 2021. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de Brasília, Brasília - DF, 2021.
- [10] KINDERMANN, C. et al. *Simulação numérica da competição entre modelos de crescimento de superfícies*. 2003. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis - SC, 2003.
- [11] RODRIGUES, E. A. *Dinâmica de corrosão: expoentes críticos, invariância de galileu e dimensão superior*. 2013. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Brasília, Brasília - DF, 2013.
- [12] EDWARDS, S. F.; WILKINSON, D. The surface statistics of a granular aggregate. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, v. 381, n. 1780, p. 17–31, 1982.
- [13] KARDAR, M.; PARISI, G.; ZHANG, Y.-C. Dynamic scaling of growing interfaces. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 56, n. 9, p. 889, 1986.
- [14] LE DOUSSAL, P.; MAJUMDAR, S. N.; ROSSO, A.; SCHEHR, G. Exact short-time height distribution in the one-dimensional kardar-parisi-zhang equation and edge fermions at high temperature. *Phys. Rev. Lett.*, v. 117, p. 070403, Aug 2016.
- [15] CALABRESE, P.; DOUSSAL, P. L.; ROSSO, A. Free-energy distribution of the directed polymer at high temperature. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 90, n. 2, p. 20002, apr 2010.

- [16] AMIR, G.; CORWIN, I.; QUASTEL, J. Probability distribution of the free energy of the continuum directed random polymer in $1 + 1$ dimensions. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, v. 64, n. 4, p. 466–537, 2011.
- [17] PRÄHOFER, M.; SPOHN, H. Universal distributions for growth processes in $1 + 1$ dimensions and random matrices. *Phys. Rev. Lett.*, v. 84, n. 21, p. 4882, 2000.
- [18] SASAMOTO, T.; SPOHN, H. One-dimensional kardar-parisi-zhang equation: An exact solution and its universality. *Phys. Rev. Lett.*, v. 104, p. 230602, Jun 2010.
- [19] SAYFIDINOV, O.; BOGNÁR, G.; KOVÁCS, E. Solution of the 1d kpz equation by explicit methods. *Symmetry*, v. 14, n. 4, 2022.
- [20] KOSKELA, J. *Numerical methods for the Kardar-Parisi-Zhang equation*. 2022. p. 63. Dissertação (Mestrado em Física) - Aalto University. School of Science, 2022.
- [21] 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.
- [22] BASSANEZI, R. *Modelagem matemática: Teoria e prática*. Editora Contexto, 2015.
- [23] GOMES-FILHO, M. S.; OLIVEIRA, F. A.; BARBOSA, M. A. A. Modeling the diffusion-erosion crossover dynamics in drug release. *Phys. Rev. E*, v. 105, p. 044110, Apr 2022.
- [24] GOMES-FILHO, M. S. *Um estudo da liberação controlada de fármacos através de modelos em rede*. 2020. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Brasília, Brasília - DF, 2020.

- [25] 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, 2021.
- [26] 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.
- [27] WOLFRAM, S. Statistical mechanics of cellular automata. *Rev. Mod. Phys.*, v. 55, p. 601–644, Jul 1983.
- [28] WOLFRAM, S. *A new kind of science*. 1. ed. Wolfram Media, 2002.
- [29] RICHELE, M.; ATMAN, A. Generalized model for solid-on-solid interface growth. *Physical Review E*, v. 91, n. 5, p. 052407, 2015.
- [30] MEAKIN, P.; RAMANLAL, P.; SANDER, L. M.; BALL, R. Ballistic deposition on surfaces. *Physical Review A*, Woodbury, v. 34, n. 6, p. 5091, 1986.
- [31] MELLO, B. A.; CHAVES, A. S.; OLIVEIRA, F. A. Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid. *Phys. Rev. E*, v. 63, p. 041113, Mar 2001.
- [32] KIM, J. M.; KOSTERLITZ, J. M. Growth in a restricted solid-on-solid model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 2289–2292, May 1989.
- [33] FAMILY, F. Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion. *Journal of Physics A: mathematical and general*, v. 19, n. 8, p. L441, 1986.
- [34] LAI, Z.-W.; SARMA, S. D. Kinetic growth with surface relaxation: Continuum versus atomistic models. *Physical review letters*, v. 66, n. 18, p. 2348, 1991.
- [35] KRUG, J.; MEAKIN, P.; HALPIN-HEALY, T. Amplitude universality for driven interfaces and directed polymers in random media. *Physical Review A*, Woodbury, v. 45, n. 2, p. 638, 1992.

- [36] MEAKIN, P. The growth of rough surfaces and interfaces. *Physics Reports*, v. 235, n. 4, p. 189–289, 1993.
- [37] DASHTI-NASERABADI, H.; SABERI, 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, 2017.
- [38] KISSINGER, T.; KOTOWICZ, A.; KURZ, O.; GINELLI, F.; HINRICHSEN, H. Nonequilibrium wetting of finite samples. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2005, n. 06, p. P06002, 2005.
- [39] GOMES-FILHO, M. S.; OLIVEIRA, F. A. The hidden fluctuation-dissipation theorem for growth. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 133, n. 1, p. 10001, 2021.
- [40] KRUG, J. Origins of scale invariance in growth processes. *Advances in Physics*, London, v. 46, n. 2, p. 139–282, 1997.
- [41] 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.
- [42] ALVES, W. S.; RODRIGUES, E. A.; FERNANDES, H. A.; MELLO, B. A.; OLIVEIRA, F. A.; COSTA, I. V. Analysis of etching at a solid-solid interface. *Physical Review E*, v. 94, n. 4, p. 042119, 2016.
- [43] 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, 2014.
- [44] de Vega, H.; WOYNAROVICH, F. Method for calculating finite size corrections in bethe ansatz systems: Heisenberg chain and six-vertex model. *Nuclear Physics B*, Amsterdam, v. 251, p. 439–456, 1985.

- [45] DERRIDA, B.; LEBOWITZ, J. L. Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process. *Physical review letters*, v. 80, n. 2, p. 209, 1998.
- [46] LUIS, E. E. M.; DE ASSIS, T. A.; OLIVEIRA, F. A. Unveiling the connection between the global roughness exponent and interface fractal dimension in EW and KPZ lattice models. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2022, n. 8, p. 083202, aug 2022.
- [47] FAMILY, F.; S VICSEK, T. *Dynamics of fractal surfaces*. World Scientific, 1991.
- [48] BROWN, R. Mikroskopische beobachtungen über die im pollen der pflanzen enthaltenen partikeln, und über das allgemeine vorkommen activer molecule in organischen und unorganischen körpern. *Annalen der Physik*, v. 90, n. 10, p. 294–313, 1828.
- [49] BROWN, R. *A brief account of microscopical observations made... on the particles contained in the pollen of plants, and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies*. 1828.
- [50] LANGEVIN, P. Sur la théorie du mouvement brownien. *Compt. Rendus*, v. 146, p. 530–533, 1908.
- [51] NYQUIST, H. Thermal agitation of electric charge in conductors. *Physical review*, v. 32, n. 1, p. 110, 1928.
- [52] JOHNSON, J. B. Thermal agitation of electricity in conductors. *Physical review*, v. 32, n. 1, p. 97, 1928.
- [53] ONSAGER, L. Reciprocal relations in irreversible processes. ii. *Physical review*, v. 38, n. 12, p. 2265, 1931.
- [54] CALLEN, H. B.; WELTON, T. A. Irreversibility and generalized noise. *Physical Review*, New York, v. 83, n. 1, p. 34, 1951.

- [55] CALLEN, H. B.; GREENE, R. F. On a theorem of irreversible thermodynamics. *Physical Review*, New York, v. 86, n. 5, p. 702, 1952.
- [56] JÜLICHER, F.; AJDARI, A.; PROST, J. Modeling molecular motors. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 69, n. 4, p. 1269, 1997.
- [57] ASTUMIAN, R. D.; BIER, M. Fluctuation driven ratchets: molecular motors. *Physical review letters*, v. 72, n. 11, p. 1766, 1994.
- [58] SCHLIWA, M.; WOEHLEKE, G. Molecular motors. *Nature*, London, v. 422, n. 6933, p. 759–765, 2003.
- [59] BARONCINI, M.; SILVI, S.; CREDI, A. Photo-and redox-driven artificial molecular motors. *Chemical reviews*, v. 120, n. 1, p. 200–268, 2019.
- [60] CHOWDHURY, D. Stochastic mechano-chemical kinetics of molecular motors: a multidisciplinary enterprise from a physicist’s perspective. *Physics Reports*, v. 529, n. 1, p. 1–197, 2013.
- [61] ASTUMIAN, R. D.; BIER, M. Mechanochemical coupling of the motion of molecular motors to atp hydrolysis. *Biophysical journal*, v. 70, n. 2, p. 637–653, 1996.
- [62] HOFFMANN, P. M. How molecular motors extract order from chaos (a key issues review). *Reports on Progress in Physics*, v. 79, n. 3, p. 032601, 2016.
- [63] BAO, J.-D. Transport in a flashing ratchet in the presence of anomalous diffusion. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 314, n. 3, p. 203–208, 2003.
- [64] BAO, J.-D.; ZHUO, Y.-Z.; OLIVEIRA, F. A.; HÄNGGI, P. Intermediate dynamics between newton and langevin. *Physical Review E*, v. 74, n. 6, p. 061111, 2006.
- [65] NETTESHEIM, G.; NABTI, I.; MURADE, C. U.; JAFFE, G. R.; KING, S. J.; SHUBEITA, G. T. Macromolecular crowding acts as a physical regulator

of intracellular transport. *Nature Physics*, v. 16, n. 11, p. 1144–1151, 2020.

- [66] CONCA, C.; DIAZ, J. I.; LINAN, A.; TIMOFTE, C. Homogenization in chemical reactive flows. *Electronic Journal of Differential Equations (EJDE)[electronic only]*, v. 2004, p. Paper–No, 2004.
- [67] GAMMAITONI, L.; HÄNGGI, P.; JUNG, P.; MARCHESONI, F. Stochastic resonance. *Reviews of modern physics*, v. 70, n. 1, p. 223, 1998.
- [68] BENZI, R.; SUTERA, A.; VULPIANI, A. The mechanism of stochastic resonance. *Journal of Physics A: mathematical and general*, v. 14, n. 11, p. L453, 1981.
- [69] HANSEN, A.; SCHMITTBUHL, J.; BATROUNI, G. G.; DE OLIVEIRA, F. A. Normal stress distribution of rough surfaces in contact. *Geophysical research letters*, v. 27, n. 22, p. 3639–3642, 2000.
- [70] 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, 2014.
- [71] GONTIS, V.; RUSECKAS, J.; KONONOVĪČIUS, A. A long-range memory stochastic model of the return in financial markets. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 389, n. 1, p. 100–106, 2010.
- [72] URRY, J. Small worlds and the new ‘social physics’. *Global networks*, v. 4, n. 2, p. 109–130, 2004.
- [73] CHEKROUN, M. D.; SIMONNET, E.; GHIL, M. Stochastic climate dynamics: Random attractors and time-dependent invariant measures. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 240, n. 21, p. 1685–1700, 2011.
- [74] MORI, H. Transport, collective motion, and brownian motion. *Progress of theoretical physics*, v. 33, n. 3, p. 423–455, 1965.

- [75] KUBO, R. Response, relaxation and fluctuation. In: *Quantum Statistical Mechanics in the Natural Sciences*. Springer, 1974. p. 299–326.
- [76] LEITE, R. C.; MOORE, R. S.; PORTO, S. P. Use of a gas laser in studies of the depolarization of the rayleigh scattering from simple liquids. *The Journal of Chemical Physics*, v. 40, n. 12, p. 3741–3742, 1964.
- [77] PENNA, A.; CHAVES, A.; ANDRADE, P. D. R.; PORTO, S. P. Light scattering by lithium tantalate at room temperature. *Physical Review B*, v. 13, n. 11, p. 4907, 1976.
- [78] MARCUS, R. A. Exchange reactions and electron transfer reactions including isotopic exchange. theory of oxidation-reduction reactions involving electron transfer. part 4.—a statistical- mechanical basis for treating contributions from solvent, ligands, and inert salt. *Discussions of the Faraday Society*, v. 29, p. 21–31, 1960.
- [79] OLIVEIRA, F. Time reversal symmetry in light scattering by excitations in a film. *Solid State Communications*, Oxford, v. 40, n. 9, p. 859–861, 1981.
- [80] LOUDON, R. *The quantum theory of light*. OUP Oxford, 2000.
- [81] SANTOS, M. L.; OLIVEIRA, E.; NETO, A. F. Rayleigh scattering of a new lyotropic nematic liquid crystal system: Crossover of propagative and diffusive behaviour. *Liquid Crystals*, v. 27, n. 11, p. 1485–1495, 2000.
- [82] BENMOUNA, F.; PENG, B.; GAPINSKI, J.; PATKOWSKI, A.; RÜHE, J.; JOHANNSMANN, D. Dynamic light scattering from liquid crystal polymer brushes swollen in a nematic solvent. *Liquid Crystals*, v. 28, n. 9, p. 1353–1360, 2001.
- [83] OLIVEIRA, F.; COTTAM, M.; TILLEY, D. Green functions, power spectra, and raman scattering of thin film polaritons. *physica status solidi (b)*, v. 107, n. 2, p. 737–747, 1981.

- [84] RAHMAN, A.; SINGWI, K.; SJÖLANDER, A. Stochastic model of a liquid and cold neutron scattering. ii. *Physical Review*, New York, v. 126, n. 3, p. 997, 1962.
- [85] YULMETYEV, R. M.; MOKSHIN, A. V.; HÄNGGI, P. Diffusion time-scale invariance, randomization processes, and memory effects in lennard-jones liquids. *Physical Review E*, v. 68, n. 5, p. 051201, 2003.
- [86] FLORENCIO JR, J.; LEE, M. H. Exact time evolution of a classical harmonic-oscillator chain. *Physical Review A*, Woodbury, v. 31, n. 5, p. 3231, 1985.
- [87] ODELL, J. A.; TAYLOR, M. A. Dynamics and thermomechanical stability of dna in solution. *Biopolymers*, New York, v. 34, n. 11, p. 1483–1493, 1994.
- [88] TOUSSAINT, R.; HELGESEN, G.; FLEKKØY, E. G. Dynamic roughening and fluctuations of dipolar chains. *Phys. Rev. Lett.*, v. 93, p. 108304, Sep 2004.
- [89] DOERR, T. P.; TAYLOR, P. L. Breaking in polymer chains. i. the harmonic chain. *The Journal of Chemical Physics*, v. 101, n. 11, p. 10107–10117, 1994.
- [90] OLIVEIRA, F. A.; TAYLOR, P. L. Breaking in polymer chains. ii. the lennard-jones chain. *The Journal of Chemical Physics*, v. 101, n. 11, p. 10118–10125, 1994.
- [91] OLIVEIRA, F. A.; GONZALEZ, J. A. Bond-stability criterion in chain dynamics. *Phys. Rev. B*, v. 54, p. 3954–3958, Aug 1996.
- [92] OLIVEIRA, F. A. Transition-state analysis for fracture nucleation in polymers: The lennard-jones chain. *Phys. Rev. B*, v. 57, p. 10576–10582, May 1998.
- [93] MAROJA, A. M.; OLIVEIRA, F. A.; CIEŚLA, M.; LONGA, L. Polymer fragmentation in extensional flow. *Phys. Rev. E*, v. 63, p. 061801, May 2001.

- [94] DIAS, C. L.; DUBÉ, M.; OLIVEIRA, F. A.; GRANT, M. Scaling in force spectroscopy of macromolecules. *Physical Review E*, v. 72, n. 1, p. 011918, 2005.
- [95] SAIN, A.; DIAS, C. L.; GRANT, M. Rupture of an extended object: A many-body kramers calculation. *Phys. Rev. E*, v. 74, p. 046111, Oct 2006.
- [96] AZEVEDO, D.; da Silva, K. A.; MAURIZ, P.; VISWANATHAN, G.; OLIVEIRA, F. Fractal behavior of poly(gc) and poly(ta) dna segments arranged in quasiperiodic fibonacci sequence. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 445, p. 27–34, 2016.
- [97] BAO, J.-D.; ZHUO, Y.-Z. Ballistic diffusion induced by a thermal broadband noise. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, p. 138104, Sep 2003.
- [98] QIU, Q.; SHI, X.-Y.; BAO, J.-D. Mixed nonergodicity of a forced system and its non-stationary strength. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 128, n. 2, p. 20005, dec 2019.
- [99] DYRE, J. C.; SCHRØDER, T. B. Universality of ac conduction in disordered solids. *Rev. Mod. Phys.*, v. 72, p. 873–892, Jul 2000.
- [100] OLIVEIRA, F. A.; MORGADO, R.; HANSEN, A.; RUBI, J. Superdiffusive conduction: Ac conductivity with correlated noise. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 357, n. 1, p. 115–121, 2005. Physics Survey of Irregular Systems.
- [101] KRAMERS, H. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, v. 7, n. 4, p. 284–304, 1940.
- [102] OLIVEIRA, F. Reaction rate theory for non-markovian systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 257, n. 1, p. 128–135, 1998.

- [103] HÄNGGI, P.; THOMAS, H. Time evolution, correlations, and linear response of non-markov processes. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v. 26, n. 1, p. 85–92, 1977.
- [104] HÄNGGI, P.; TALKNER, P.; BORKOVEC, M. Reaction-rate theory: fifty years after kramers. *Rev. Mod. Phys.*, v. 62, p. 251–341, Apr 1990.
- [105] GONZALEZ, J. A.; OLIVEIRA, F. A. Nucleation theory, the escaping processes, and nonlinear stability. *Phys. Rev. B*, v. 59, p. 6100–6105, Mar 1999.
- [106] BOCCALETTI, S.; KURTHS, J.; OSIPOV, G.; VALLADARES, D.; ZHOU, C. The synchronization of chaotic systems. *Physics Reports*, v. 366, n. 1, p. 1–101, 2002.
- [107] LONGA, L.; CURADO, E. M. F.; OLIVEIRA, F. A. Roundoff-induced coalescence of chaotic trajectories. *Phys. Rev. E*, v. 54, p. R2201–R2204, Sep 1996.
- [108] MARITAN, A.; BANAVAR, J. R. Chaos, noise, and synchronization. *Phys. Rev. Lett.*, v. 72, p. 1451–1454, Mar 1994.
- [109] CIEŚLA, M.; DIAS, S. P.; LONGA, L.; OLIVEIRA, F. A. Synchronization induced by langevin dynamics. *Phys. Rev. E*, v. 63, p. 065202, May 2001.
- [110] OSIPOV, G. V.; KURTHS, J.; ZHOU, C. *Synchronization in oscillatory networks*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [111] MORGADO, R.; CIEŚLA, M.; LONGA, L.; OLIVEIRA, F. A. Synchronization in the presence of memory. *Europhysics Letters*, Les Ulis, v. 79, n. 1, p. 10002, jun 2007.
- [112] PINTO, P. D.; OLIVEIRA, F. A.; PENNA, A. L. A. Thermodynamics aspects of noise-induced phase synchronization. *Phys. Rev. E*, v. 93, p. 052220, May 2016.

- [113] PINTO, P. D.; PENNA, A. L. A.; OLIVEIRA, F. A. Critical behavior of noise-induced phase synchronization. *Europhysics Letters*, Les Ulis, v. 117, n. 5, p. 50009, may 2017.
- [114] SIEPMANN, J.; SIEPMANN, F. Modeling of diffusion controlled drug delivery. *Journal of Controlled Release*, v. 161, n. 2, p. 351–362, 2012. Drug Delivery Research in Europe.
- [115] Gomes Filho, M. S.; OLIVEIRA, F. A.; BARBOSA, M. A. A. A statistical mechanical model for drug release: Investigations on size and porosity dependence. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 460, p. 29–37, 2016.
- [116] IGNACIO, M.; CHUBYNSKY, M. V.; SLATER, G. W. Interpreting the weibull fitting parameters for diffusion-controlled release data. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 486, p. 486–496, 2017.
- [117] SINGH, K.; SATAPATHI, S.; JHA, P. K. “ant-wall” model to study drug release from excipient matrix. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 519, p. 98–108, 2019.
- [118] MIRCIOIU, C.; VOICU, V.; ANUTA, V.; TUDOSE, A.; CELIA, C.; PAOLINO, D.; FRESTA, M.; SANDULOVICI, R.; MIRCIOIU, I. Mathematical modeling of release kinetics from supramolecular drug delivery systems. *Pharmaceutics*, v. 11, n. 3, p. 140, 2019.
- [119] GOMES-FILHO, M. S.; BARBOSA, M. A. A.; OLIVEIRA, F. A. A statistical mechanical model for drug release: Relations between release parameters and porosity. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 540, p. 123165, 2020.
- [120] YANG, Y.; QIAO, X.; HUANG, R.; CHEN, H.; SHI, X.; WANG, J.; TAN, W.; TAN, Z. E-jet 3d printed drug delivery implants to inhibit growth and

- metastasis of orthotopic breast cancer. *Biomaterials*, v. 230, p. 119618, 2020.
- [121] MORGADO, R.; OLIVEIRA, F. A.; BATROUNI, G. G.; HANSEN, A. Relation between anomalous and normal diffusion in systems with memory. *Phys. Rev. Lett.*, v. 89, p. 100601, Aug 2002.
- [122] OLIVEIRA, F. A.; MORGADO, R.; DIAS, C.; BATROUNI, G. G.; HANSEN, A. Comment on “nonstationarity induced by long-time noise correlations in the langevin equation”. *Phys. Rev. Lett.*, v. 86, p. 5839–5839, Jun 2001.
- [123] SANCHO, J. M.; LACASTA, A. M.; LINDENBERG, K.; SOKOLOV, I. M.; ROMERO, A. H. Diffusion on a solid surface: Anomalous is normal. *Phys. Rev. Lett.*, v. 92, p. 250601, Jun 2004.
- [124] LAPAS, L. C.; MORGADO, R.; VAINSTEIN, M. H.; RUBÍ, J. M.; OLIVEIRA, F. A. Khinchin theorem and anomalous diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, v. 101, p. 230602, Dec 2008.
- [125] WERON, A.; MAGDZIARZ, M. Generalization of the khinchin theorem to lévy flights. *Phys. Rev. Lett.*, v. 105, p. 260603, Dec 2010.
- [126] THIEL, F.; FLEGEL, F.; SOKOLOV, I. M. Disentangling sources of anomalous diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, v. 111, p. 010601, Jul 2013.
- [127] DOREA, C. C.; MEDINO, A. V. Anomalous diffusion index for lévy motions. *Journal of statistical physics*, v. 123, n. 3, p. 685–698, 2006.
- [128] DONATO, C.; OLIVEIRA, F.; GOMES, M. Anomalous diffusion on crumpled wires in two dimensions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 368, n. 1, p. 1–6, 2006.
- [129] MCKINLEY, S. A.; NGUYEN, H. D. Anomalous diffusion and the generalized langevin equation. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, v. 50, n. 5, p. 5119–5160, 2018.

- [130] dos Santos, M. A. Analytic approaches of the anomalous diffusion: A review. *Chaos, Solitons & Fractals*, v. 124, p. 86–96, 2019.
- [131] VAINSTEIN, M.; MORGADO, R.; OLIVEIRA, F.; de Moura, F.; COUTINHO-FILHO, M. Stochastic description of the dynamics of a random-exchange heisenberg chain. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 339, n. 1, p. 33–38, 2005.
- [132] VAINSTEIN, M. H.; LAPAS, L. C.; OLIVEIRA, F. A. Anomalous diffusion. *Acta Physica Polonica: B.*, v. 39, p. 1273, 2008.
- [133] LAPAS, L. C.; FERREIRA, R. M.; RUBÍ, J. M.; OLIVEIRA, F. A. Anomalous law of cooling. *The Journal of chemical physics*, v. 142, n. 10, p. 104106, 2015.
- [134] GRIGERA, T. S.; ISRAELOFF, N. E. Observation of fluctuation-dissipation-theorem violations in a structural glass. *Phys. Rev. Lett.*, v. 83, p. 5038, 1999.
- [135] RICCI-TERSENGHI, F.; STARIOLO, D. A.; ARENZON, J. J. Two time scales and violation of the fluctuation-dissipation theorem in a finite dimensional model for structural glasses. *Phys. Rev. Lett.*, v. 84, p. 4473–4476, May 2000.
- [136] CRISANTI, A.; RITORT, F. Violation of the fluctuation–dissipation theorem in glassy systems: basic notions and the numerical evidence. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 36, n. 21, p. R181, may 2003.
- [137] 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.
- [138] 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.

- [139] HAYASHI, K.; TAKANO, M. Violation of the fluctuation-dissipation theorem in a protein system. *Biophysical Journal*, v. 93, n. 3, p. 895–901, 2007.
- [140] PÉREZ-MADRID, A.; LAPAS, L. C.; RUBÍ, J. M. Heat exchange between two interacting nanoparticles beyond the fluctuation-dissipation regime. *Phys. Rev. Lett.*, v. 103, p. 048301, Jul 2009.
- [141] AVERIN, D. V.; PEKOLA, J. P. Violation of the fluctuation-dissipation theorem in time-dependent mesoscopic heat transport. *Phys. Rev. Lett.*, v. 104, p. 220601, Jun 2010.
- [142] OLIVEIRA, F. A.; MORGADO, R.; LIMA, M. V. B. T.; MELLO, B. A.; HANSEN, A.; BATROUNI, G. G. Comment on “dynamical foundations of nonextensive statistical mechanics”. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, p. 218901, May 2003.
- [143] LAPAS, L. C.; COSTA, I. V. L.; VAINSTEIN, M. H.; OLIVEIRA, F. A. Entropy, non-ergodicity and non-gaussian behaviour in ballistic transport. *Europhysics Letters*, Les Ulis, v. 77, n. 3, p. 37004, jan 2007.
- [144] COSTA, I. V. L.; MORGADO, R.; LIMA, M. V. B. T.; OLIVEIRA, F. A. The Fluctuation-Dissipation Theorem fails for fast superdiffusion. *Europhys. Lett.*, v. 63, p. 173, 2003.
- [145] COSTA, I. V.; VAINSTEIN, M. H.; LAPAS, L. C.; BATISTA, A. A.; OLIVEIRA, F. A. Mixing, ergodicity and slow relaxation phenomena. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 371, n. 1, p. 130–134, 2006.
- [146] VAINSTEIN, M.; COSTA, I.; OLIVEIRA, F. *Mixing, ergodicity and the fluctuation-dissipation theorem in complex systems*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006. p. 159–188.

- [147] OLIVEIRA, F. A.; FERREIRA, R. M.; LAPAS, L. C.; VAINSTEIN, M. H. Anomalous diffusion: A basic mechanism for the evolution of inhomogeneous systems. *Frontiers in Physics*, v. 7, p. 18, 2019.
- [148] GUDOWSKA-NOWAK, E.; OLIVEIRA, F. A.; WIO, H. S. Editorial: The fluctuation-dissipation theorem today. *Frontiers in Physics*, v. 10, 2022.
- [149] LEDERMAN, L. M.; HILL, C. T. *Symmetry and the beautiful universe*. Prometheus books, 2011.
- [150] LEONEL, E. D. *Invariância de escala em sistemas dinâmicos não lineares*. Editora Blucher, 2019.
- [151] LESNE, A.; LAGUËS, M. *Scale invariance: From phase transitions to turbulence*. Springer Science & Business Media, 2011.
- [152] COSTA, I. V. D. L. *Processos estocásticos: Difusão e crescimento*. 2006. 2006. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Brasília, Brasília - DF, 2006.
- [153] ARFKEN, G.; WEBER, H. H. *Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física*. Elsevier, 2007.
- [154] BUTKOV, E. *Física matemática. rio de janeiro*. 1978.
- [155] ALMEIDA, D. P. *Classes de universalidade na equação de Edwards-Wilkinson com memória*. 2016. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de Brasília, Brasília - DF, 2016.
- [156] MURRAY, E. A two-dimensional growth process. In: . c1960. v. 4. p. 223.
- [157] PEITGEN, H.-O.; JÜRGENS, H.; SAUPE, D. *Fractals for the classroom: part two: complex systems and mandelbrot set*. Springer Science & Business Media, 2012.

- [158] LEVADA, A. Introdução a computação em Python: Problemas e Aplicações, 08 2020.
- [159] VOLD, M. J. Sediment volume and structure in dispersions of anisometric particles. *The Journal of Physical Chemistry*, v. 63, n. 10, p. 1608–1612, 1959.
- [160] FAMILY, F. Dynamic scaling and phase transitions in interface growth. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 168, n. 1, p. 561–580, 1990.
- [161] FARNUDI, B.; VVEDENSKY, D. D. Large-scale simulations of ballistic deposition: The approach to asymptotic scaling. *Phys. Rev. E*, v. 83, p. 020103, Feb 2011.
- [162] REIS, F. A. Universality in two-dimensional kardar-parisi-zhang growth. *Physical Review E*, v. 69, n. 2, p. 021610, 2004.
- [163] REIS, F. A. Dynamic transition in etching with poisoning. *Physical Review E*, v. 68, n. 4, p. 041602, 2003.
- [164] REIS, F. A. Numerical study of roughness distributions in nonlinear models of interface growth. *Physical Review E*, v. 72, n. 3, p. 032601, 2005.
- [165] CARRASCO, I. S.; OLIVEIRA, T. J. Kardar-parisi-zhang growth on one-dimensional decreasing substrates. *Physical Review E*, v. 98, n. 1, p. 010102, 2018.
- [166] CARRASCO, I.; TAKEUCHI, K.; FERREIRA, S.; OLIVEIRA, T. Interface fluctuations for deposition on enlarging flat substrates. *New Journal of Physics*, v. 16, n. 12, p. 123057, 2014.
- [167] SONG, L.-J.; TANG, G.; XUN, Z.-P.; HAO, D.-P.; CHEN, Y.-L.; ZHANG, Z. Influences of fractal substrate structures on dynamic scaling behaviors

- of etching model. *Communications in Theoretical Physics*, v. 68, n. 4, p. 471, 2017.
- [168] XUN, Z.; TANG, G.; SONG, L.; HAN, K.; XIA, H.; HAO, D.; YANG, Y. Dynamic scaling behaviors of the etching model on fractal substrates. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2014, n. 12, p. P12008, 2014.
- [169] COSTA, I. V.; FERNANDES, H. A.; MELLO, B. A.; OLIVEIRA, F. A. An analytical formulation for roughness based on celular automata. *arXiv preprint arXiv:1208.5063*, 2012.
- [170] EVANS, J. W.; KANG, H. Analytic observations for the $d=1+1$ bridge site (or single-step) deposition model. *Journal of mathematical physics*, v. 32, n. 10, p. 2918–2922, 1991.
- [171] PLISCHKE, M.; RÁ CZ, Z.; LIU, D. Time-reversal invariance and universality of two-dimensional growth models. *Physical Review B*, v. 35, n. 7, p. 3485, 1987.
- [172] SANTEN, L.; APPERT, C. The asymmetric exclusion process revisited: fluctuations and dynamics in the domain wall picture. *Journal of statistical physics*, v. 106, n. 1, p. 187–199, 2002.
- [173] GWA, L.-H.; SPOHN, H. Six-vertex model, roughened surfaces, and an asymmetric spin hamiltonian. *Physical review letters*, v. 68, n. 6, p. 725, 1992.
- [174] JUMARIE, G. Laplace’s transform of fractional order via the mittag–leffler function and modified riemann–liouville derivative. *Applied Mathematics Letters*, v. 22, n. 11, p. 1659–1664, 2009.
- [175] ANASTASSIOU, G. A. Principles of delta fractional calculus on time scales and inequalities. *Mathematical and Computer Modelling*, v. 52, n. 3, p. 556–566, 2010.

- [176] EDUARDO. Topologia - descrição geral.
<http://www.nartlof.com/default.aspx>, 2010.
- [177] OLIVEIRA, T. J.; ALVES, S. G.; FERREIRA, S. C. Kardar-Parisi-Zhang universality class in $(2+1)$ dimensions: Universal geometry-dependent distributions and finite-time corrections. *Physical Review E*, v. 87, n. 4, p. 040102, 2013.
- [178] KONDEV, J.; HENLEY, C. L.; SALINAS, D. G. Nonlinear measures for characterizing rough surface morphologies. *Physical Review E*, v. 61, n. 1, p. 104, 2000.
- [179] ALVES, L. M. Foundations of measurement fractal theory for the fracture mechanics. *Applied fracture mechanics*, p. 19–66, 2012.