

**Estudo da distribuição de alturas em modelos competitivos com componentes Kardar-Parisi-Zhang e dos efeitos de não linearidade no potencial eletrostático em uma região confinada.**

*Caio Porto de Castro*

**Estudo da distribuição de alturas  
em modelos competitivos com  
componentes Kardar-Parisi-Zhang  
e dos efeitos de não linearidade no  
potencial eletrostático em uma  
região confinada.**

Caio Porto de Castro

Orientador: Prof. Dr. Thiago Albuquerque de Assis

Co-Orientador: Prof. Dr. Caio Mário Castro de Castilho

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia  
como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Agosto de 2013

Dedico esta dissertação aos meus amados pais Charles e Jesseni.

# Agradecimentos

Aos meus pais, por apoiarem minha escolha de estudar física e pelos muitos e importantes conselhos.

Aos Professores Thiago Albuquerque, Caio Castilho, Roberto Andrade e Fernando de Brito por contribuírem diretamente para realização desta dissertação.

Ao Grupo de Física de Superfícies e Materiais pelas discussões ao longo de todo este trabalho.

À minha namorada Bianca Ravena pelo companheirismo, compreensão e paciência devido aos meus momentos de ausência.

Aos amigos que conquistei no Instituto de Física, pelos bons momentos juntos.

À Pós-Graduação do IF pelo apoio.

# Resumo

Neste trabalho apresenta-se um estudo da distribuição das alturas escaladas de perfis irregulares crescidos em 1+1 dimensões, a partir de um modelo competitivo com componentes que se acreditam ser classes de universalidade Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) (Deposição Balística + *Restrict Solid on Solid* (RSOS)). Usou-se um parâmetro de controle  $p$  que representa a probabilidade da partícula ser depositada seguindo o modelo RSOS. Além de estudar a morfologia de perfis crescidos para distintos valores de  $p \in [0, 1]$ , corroborando resultados de trabalhos prévios, contribuiu-se com um estudo detalhado das distribuições de alturas para um tempo máximo de deposição  $t_{max} = 2 \times 10^4$  monocamadas, variando-se o parâmetro  $p$ . Os resultados indicaram, como consequência do efeito de tempo finito, uma transição aparente KPZ-EW-KPZ, com ponto crítico para  $p \approx 0.83$ . De posse das informações a respeito da morfologia destes perfis, os mesmos foram utilizados como uma das fronteiras (cátodo) de uma região desprovida de cargas, atribuindo-lhes um potencial elétrico fixo e nulo (trabalhando com a hipótese do mesmo ser condutor). Na outra fronteira (ânodo), foi utilizado um perfil linear com potencial também fixo e diferente de zero. Nesta região entre os eletrodos, foi calculado o potencial elétrico por meio da solução numérica da equação de Laplace, utilizando o método de Liebmann. Os perfis equipotenciais foram calculados para diferentes perfis irregulares e um estudo sistemático das correspondentes morfologias foi realizado. Os resultados sugerem que a morfologia dos perfis equipotenciais variam (quando os mesmos se afastam da superfície irregular) de maneira semelhante, considerando-se os coeficientes dos termos não lineares da equação KPZ ( $\lambda$ ) como positivo, nulo ou negativo.

O conteúdo do capítulo 3 corresponde ao material publicado no Physical Review E **86**, 051607 (2012). O conteúdo do capítulo 4 será submetido a publicação.

# Abstract

In this work we present a study of scaled height distributions of irregular profiles grown in 1+1 considering a competitive model with Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) class of universalities components (Ballistic Deposition + *Restrict Solid on Solid* (RSOS)). We use a parameter  $p$  which represents the probability to follow the RSOS growth. Besides studying the morphology of grown profiles for different values of  $p \in [0, 1]$ , confirming results of previous studies, this work contributes with a detailed study of the height distributions to a maximum time of deposition  $t_{max} = 2 \times 10^4$  monolayers, varying the parameter  $p$ . Our results indicate, as a consequence of finite time effects, an apparent transition KPZ-EW-KPZ, with a critical point at  $p \approx 0.83$ . With the morphological information of our rough profiles, the later were considered as a conducting material (cathode) with null constant electric potential. For the other boundary, also considered as being a conductor (anode), we attribute an electric potential different of zero. In the region confined by the two conductors, the electric potential has been evaluated solving numerically the Laplace equation by the Liebmanns method. The equipotential profiles were calculated for different irregular profiles and a systematic study of the corresponding morphology has been done. Our results suggest that the morphology of equipotential profiles changes (away from the irregular cathode profile) in a similar way, considering the coefficients of the non-linear term of the KPZ equation ( $\lambda$ ) as positive, null or negative.

The content of Chapter 3 corresponds to the material published in Physical Review E **86**, 051607 (2012). The content of Chapter 4 will be submitted for publication.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Propriedades Morfológicas e Modelos Discretos de Crescimento de Interfaces Rugosas</b>	<b>4</b>
2.1	Conceitos de Escala . . . . .	5
2.2	Modelos de Crescimento . . . . .	10
2.2.1	Deposição Randômica - DR . . . . .	11
2.2.2	Deposição Randômica com Difusão (Modelo de Family) - MF . . . . .	13
2.2.3	Deposição Balística - DB . . . . .	17
2.2.4	Deposição Restricted Solid On Solid - RSOS . . . . .	19
2.3	Distribuição de Alturas . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Resultados - Aspectos Morfológicos</b>	<b>28</b>
3.1	Propriedades de Escala . . . . .	29
3.2	Distribuição de Alturas: Regime não-linear . . . . .	35
3.3	Distribuição de Alturas : Intervalo de Transição . . . . .	38
3.4	Conclusões . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Estudo do Potencial Elétrico em uma Região Confinada.</b>	<b>43</b>
4.1	Equação de Laplace . . . . .	44
4.2	Discussão e Resultados . . . . .	47
<b>5</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>55</b>
<b>A</b>	<b>Trabalho publicado</b>	<b>63</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Os estudos sobre a morfologia de interfaces irregulares são de significativa importância, tendo em vista que grande parte das interfaces formadas na natureza e as produzidas artificialmente são irregulares. A formação destas interfaces são influenciadas por um grande número de fatores, sendo às vezes quase impossível distinguí-los. A ação de leis básicas pode ser representada microscopicamente através de um modelo discreto. Estes modelos, no limite hidrodinâmico, são descritos por equações diferenciais. Com isso, levando-se em conta o conjunto dos mecanismos característico de cada modelo discreto, suas respectivas leis básicas, e suas respectivas equações de crescimento, estes modelos são classificados em classes de universalidades. Entretanto modelos discretos, com regras locais de crescimento distintas, podem compartilhar de mesmas propriedades morfológicas e, com isto, pertencerem à mesma classe de universalidade. Podemos citar como exemplos os modelo de deposição balístico e o modelo *Restrict Solid On Solid* (RSOS), os quais pertencem à classe de universalidade Kardar, Parisi e Zhang (KPZ). Porém, se utilizarmos ambos os modelos de crescimento para crescer interfaces, não podemos afirmar que esse tipo de crescimento, dito competitivo, se dá com a mesma dinâmica de modelos que utilizam as regras locais isoladamente. Devido à grande quantidade de fatores que influenciam a dinâmica de crescimento, simulações de modelos competitivos são mais realísticos, por levam em consideração mais de uma regra local de crescimento. Sendo assim, este trabalho apresenta uma análise morfológica deste modelo competitivo, através das estimativas dos expoentes

críticos e do estudo da distribuição das alturas. O estudo das distribuições de alturas vem sendo utilizado com mais frequência a partir do início deste século, com a obtenção da solução exata da equação KPZ, vindo a confirmar o que as conjecturas e simulações já obtinham como resultados.

Um vasto conhecimento a respeito da morfologia de interfaces irregulares possibilita uma melhor compreensão da interação existente entre, por exemplo, o campo eletrostático e a matéria. No entanto, calcular o valor do campo elétrico próximo às superfícies, calcular área de emissão, a corrente de emissão e até a determinação experimental da função trabalho, são precedidos do cálculo do potencial elétrico ou, ainda, de equipotenciais próximas à interface irregular. A microeletrônica de vácuo e a utilização de microscópio de alta resolução como AFM (Atomic Force Microscope), capaz de identificar formações em escala atômica, exemplificam a importância do estudo da influência de irregularidades na interface sobre a morfologia das equipotenciais. Pensando nisto, após conhecermos melhor a morfologia das interfaces crescidas pelo modelo competitivo, balístico+RSOS, estudamos como as equipotenciais, geradas numa região compreendida entre um perfil plano e outro irregular, se modificam morfologicamente devido à presença de irregularidades em um dos perfis. A análise da morfologia de equipotenciais pode ajudar a encontrar uma região no espaço que melhor possibilite a utilização de uma microscopia de prova. Esta região pode ser distante o bastante para evitar interações indesejadas entre a ponta de um aparelho de AFM e a superfície, mas também precisa estar próxima o bastante para que os efeitos das irregularidades ainda sejam sentidos pelas equipotenciais. Com a identificação de uma região “ótima” de distância do perfil irregular, pode-se estudar as diferentes famílias de equipotenciais, geradas por distintos perfis irregulares, de modo a identificar a possibilidade de, por meio do estudo da morfologia das equipotenciais, distinguir os distintos perfis.

Além da presente introdução, esta dissertação possui mais 4 capítulos. No capítulo 2 são apresentados alguns modelos de crescimento discreto classificando-os segundo as suas respectivas classes de universalidade. São apresentadas também a sequência das análises das propriedades de escala e das distribuições das alturas esca-

ladas, necessárias para conhecer as propriedades morfológicas dos modelos. O capítulo 3 apresenta o modelo competitivo estudado e os resultados das propriedades morfológicas dos perfis crescidos seguindo este modelo. Nestas análises encontram-se as propriedades de escala e o estudo da distribuição de alturas dos perfis. No capítulo 4 é apresentado o estudo da morfologia de equipotencias geradas numa região compreendida entre um perfil plano e outro irregular, associando a morfologia dos perfis utilizados no capítulo 3, crescidos através do modelo competitivo, à morfologia destas equipotenciais. Por fim, no capítulo 5, encontram-se as conclusões, discutindo-se as perspectivas de estudos futuros.

Nesta dissertação inclui-se também um apêndice com a publicação dos resultados discutidos no capítulo 3.

## Capítulo 2

# Propriedades Morfológicas e Modelos Discretos de Crescimento de Interfaces Rugosas

Neste capítulo serão apresentadas algumas quantidades que visam caracterizar morfolologicamente uma superfície irregular, superfície esta que resulta de um processo de deposição. Serão definidos os expoentes críticos e analisadas as quantidades estatísticas que caracterizam a distribuição de alturas das interfaces rugosas a partir de simulações computacionais no espaço discreto. Na seção 2.1 apresentar-se-ão as propriedades de escala dessas superfícies. Na seção 2.2 serão discutidos alguns modelos de crescimento, dentre eles os modelos utilizados neste trabalho, juntamente com as equações diferenciais estocásticas que os descrevem no limite hidrodinâmico. Já na seção 2.3 será feita uma análise da distribuição das alturas bem como das quantidades que as caracterizam ( skewness, kurtosis )<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>Skewness em algumas referências em língua portuguesa é encontrada como coeficiente de assimetria. Kurtosis é traduzida como curtose.

## 2.1 Conceitos de Escala

Para descrever quantitativamente a dinâmica de crescimento de uma superfície rugosa, é necessário definir algumas quantidades que caracterizam a sua morfologia. A primeira delas, a altura média da interface, é definida por:

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L^d} \sum_{i=0}^{L^d} h_i(t) \quad , \quad (2.1)$$

onde  $h_i(t)$  é a altura de uma coluna  $i$  para um determinado tempo  $t$  (considera-se uma unidade de tempo, a deposição de  $L^d$  partículas),  $d$  é a dimensão topológica do substrato, e  $L$  o tamanho linear do substrato.

Se o fluxo de partículas é constante, ou seja, se não varia o número de partículas que são depositadas por unidade de tempo, tem-se:

$$\bar{h}(t) \sim t \quad . \quad (2.2)$$

A rugosidade global (largura de interface) pode ser definida como o desvio quadrático médio das alturas dos sítios, ou seja:

$$\Omega_L(t) = \langle [ \overline{(h - \bar{h})^2} ]^{\frac{1}{2}} \rangle_c \quad , \quad (2.3)$$

onde  $\bar{h} = \bar{h}(t)$ . As barras superiores representam uma média espacial e  $\langle \dots \rangle_c$  uma média configuracional, ou seja, uma média sobre várias realizações independentes.

À medida em que as partículas são depositadas as alturas das colunas associadas aos sítios variam. Sendo assim, é esperado que o valor da rugosidade global cresça com tempo de deposição, considerando os estágios iniciais de crescimento. Logo, a forma com que essa variação ocorre se torna uma informação importante na dinâmica de crescimento.

Na figura 2.1, é ilustrado um processo de crescimento de uma interface rugosa com três etapas distintas, separadas por um tempo característico  $t_0$  [1] e por um tempo de saturação  $t_x$ . Para as regiões onde  $t \ll t_0$  e  $t_0 \ll t \ll t_x$ , a rugosidade global

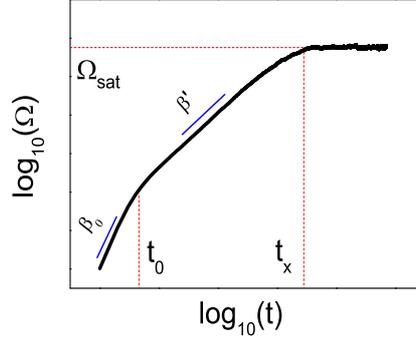


Figura 2.1: Comportamento típico da evolução temporal da rugosidade global, mostrando-se os estágios que incorporam o “crossover” para um regime de crescimento e deste último para a saturação.

crece com o tempo seguindo uma lei de potência, na forma,

$$\Omega_L(t) = ct^\beta \quad , \quad (2.4)$$

onde  $c$  é uma constante que depende do modelo de crescimento e o expoente  $\beta$ , chamado expoente de crescimento global, caracteriza a dependência temporal dinâmica da rugosidade global. Durante a primeira etapa  $\beta_0$  assume um valor que se aproxima do valor que define os modelos descorrelacionados,  $\beta = 1/2$  [2] ; em seguida,  $\beta' < \beta_0$  sugere a presença de correlações na interface, sendo seu valor dependente da classe de universalidade pertencente.

Para  $t \gg t_x$  o sistema segue para um regime de saturação (região “horizontal” da figura 2.1) chegando a um valor máximo para a rugosidade global, que define a rugosidade de saturação ( $\Omega_{sat}$ ).  $\Omega_{sat}$  depende do tamanho do sistema e esta dependência também segue uma lei de potência, dada por:

$$\Omega_{sat} = aL^\alpha \quad [t \gg t_x], \quad (2.5)$$

onde o expoente  $\alpha$ , conhecido como expoente de rugosidade global, caracteriza como a rugosidade de saturação varia com o tamanho do sistema. A constante  $a$ , da mesma maneira que a constante  $c$  da equação 2.4, depende do modelo de crescimento.

Geralmente, para crescimentos em condições fora do equilíbrio, o tamanho do

sistema por si só pode ser um parâmetro que influencia na dinâmica espaço-temporal do sistema [3, 4]. Deste modo, as relações de escala associadas às flutuações locais podem ser diferentes das obtidas quando são consideradas as flutuações globais. Sendo assim, a rugosidade pode ser calculada localmente, variando a “janela” de cálculo, ou seja, calculando-a desde pequenos comprimentos de “janela” até tamanhos próximos ao comprimento do substrato. A evolução da rugosidade com o comprimento da “janela” de cálculo também segue a relação 2.5, mas com o expoente de rugosidade local ( $\alpha_{loc}$ ) [3, 5]. O  $\alpha_{loc}$  se distingue do  $\alpha$ , pois seu cálculo ocorrer a partir de comprimentos muito menores do que o tamanho da interface, fornecendo assim uma informação da variação local da rugosidade. De fato, experimentalmente se torna mais viável a determinação do  $\alpha_{loc}$ , uma vez que o regime de saturação em geral não é alcançado, pelo menos quando se pensa em tecnologias associadas ao crescimento de filmes finos [6].

O instante  $t_x$  é outra variável que depende do tamanho do sistema analisado e também escala com o comprimento seguindo uma lei de potência,

$$t_x = bL^z \quad , \quad (2.6)$$

onde  $z$  é chamado de expoente dinâmico global e  $b$  uma constante que, como anteriormente, também depende do modelo de crescimento.

Os expoentes vistos nas relações 2.4, 2.5 e 2.6 não são independentes. Para conhecer a relação existente entre tais expoentes é necessário encontrar uma função escala, que pode ser obtida a partir do colapso das curvas  $\log_{10}(\Omega) \times \log_{10}(t)$  de vários sistemas que saturam com valores de  $\Omega_{sat}$  e  $t_x$  diferentes, como mostrado na figura 2.2. Então, considerando  $\log_{10}(\Omega_L(t)/\Omega_{sat})$  como uma função do  $\log_{10}(t)$ , as curvas terão valores de saturação iguais, independente do tamanho do sistema (figura 2.3). A partir da transformação anterior, faz-se a transformação no tempo,  $t \rightarrow t/t_x$ , e assim obtém-se o colapso das curvas que saturam simultaneamente (figura 2.4). Estas análises sugerem que  $\Omega_L(t)/\Omega_{sat}$  é uma função de  $t/t_x$  (quando flutuações locais e globais coincidem), i.e,

$$\frac{\Omega_L(t)}{\Omega_{sat}} \sim f\left(\frac{t}{t_x}\right) \quad , \quad (2.7)$$

onde  $f(t/t_x) = f(u)$  é conhecido como função escala. Substituindo as relações 2.5 e 2.6 na relação 2.7, encontra-se a relação de escala de *Family-Vicsek* [2],

$$\Omega_L(t) \approx L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) \quad . \quad (2.8)$$

A função escala,  $f(u)$ , é analisada em duas regiões:

- (i) Para  $u \ll 1$  a função escala cresce seguindo uma lei de potência  $f(u) \sim u^\beta$ .
- (ii) Para  $t \rightarrow \infty$  ocorre a saturação da rugosidade, de modo que a função escala torna-se constante, ou seja,  $f(u) = const.$  para  $u \gg 1$ .

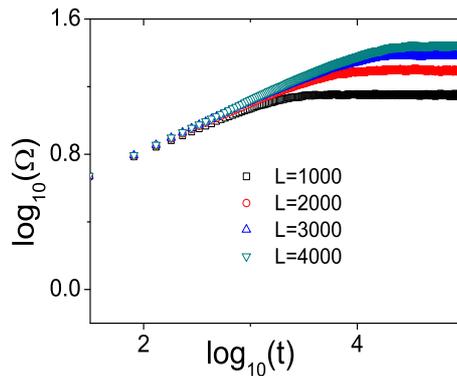


Figura 2.2: Evolução temporal da rugosidade global para sistemas de distintos tamanhos.

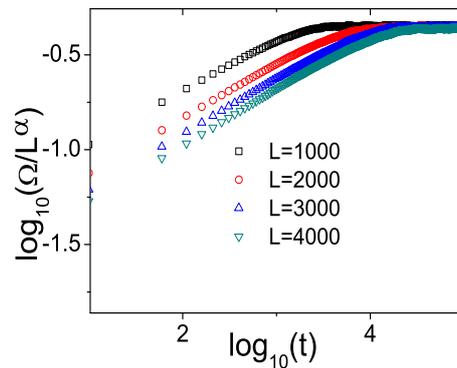


Figura 2.3: Curvas que resultam da transformação de escala  $\Omega \rightarrow \Omega/L^\alpha$ .

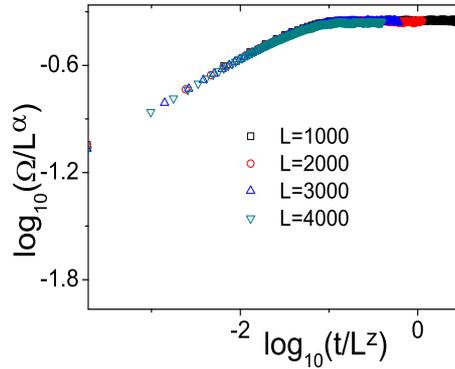


Figura 2.4: Colapso das curvas para  $t \gg t_0$ , mostrando que a relação 2.8 é válida.

Substituindo as relações 2.4 e 2.5 em 2.8 para  $t = t_x$ , obtém-se ,

$$t_x^\beta \approx L^\alpha \quad . \quad (2.9)$$

Utilizando a relação 2.6, encontra-se a relação existente entre os expoentes críticos, tal que:

$$L^{z \cdot \beta} \approx L^\alpha \Rightarrow z = \frac{\alpha}{\beta} \quad . \quad (2.10)$$

Como os expoentes de escala não dependem dos detalhes microscópicos, é possível dividir os modelos em classe de universalidades de acordo com seus valores [2, 7]. Uma característica interessante de alguns modelos de crescimento aparece devido à diferença entre o expoente de rugosidade global e o expoente de rugosidade local. Esta característica é conhecida na literatura como rugosidade anômala [3, 5]. Se o sistema possuir  $\alpha = \alpha_{loc}$ , a relação de escala é dada pela expressão 2.8. Caso o sistema apresente rugosidade anômala, é esperada uma relação de escala que inclua um novo termo dependente do  $\alpha_{loc}$  [8].

Um importante questionamento é o que leva a rugosidade global a saturar. O fato do  $t_x$  e  $\Omega_{sat}$  aumentarem com o tamanho do sistema sugere que o fenômeno de saturação constitui um efeito de tamanho finito. A característica de saturar aparece em modelos de tamanho finito e que possuem regras de crescimento locais ou não locais, ou seja, que exigem uma correlação entre os sítios. Esta correlação tem uma influência determinante no comportamento do sistema pois, à medida em que as partículas são depositadas a altura de um sítio passa a depender da altura do seus vizinhos, propagando deste modo a informação sítio a sítio, tornando a interface cor-

relacionada. Esta distância característica sobre a qual os sítios estão correlacionados é chamada de comprimento de correlação ( $\xi_{\parallel}$ ). Se um processo de deposição começa a partir de um substrato plano, no início os sítios estão descorrelacionados. Mas, com o passar do tempo, o comprimento de correlação aumenta e, como os sistemas são finitos,  $\xi_{\parallel}$  atinge a mesma ordem de grandeza do tamanho  $L$  do substrato. Deste modo, a rugosidade global começa a saturar. Sendo assim, de acordo com a relação 2.8, a saturação ocorre a partir de  $t_x$ , e portanto,

$$\xi_{\parallel} \sim L \quad [t \gg t_x], \quad (2.11)$$

e

$$\xi_{\parallel} \sim t^{\frac{1}{z}} \quad [t \ll t_x]. \quad (2.12)$$

## 2.2 Modelos de Crescimento

Uma grande variedade de processos dinâmicos, naturais ou artificiais, geram padrões estruturais que são considerados complexos, principalmente devido à grande quantidade de fatores que influenciam na dinâmica de formação de uma determinada morfologia. Crescimento de colônias de bactérias [9], eletrodeposição [10], MBE (Molecular Beam Epitaxy) [11, 12] são alguns poucos exemplos. Existe uma série de modelos discretos que visam descrever os processos de crescimento reais. Apesar dos modelos possuírem regras de crescimento distintas, os mesmos podem compartilhar características morfológicas similares, como expoentes de escala e propriedades estatísticas (cumulantes, skewness e kurtosis da distribuição de alturas associadas aos sítios). Sendo assim, podem ser descritos por uma mesma equação diferencial estocástica<sup>2</sup>. No limite hidrodinâmico ( $L \rightarrow \infty$  e  $t \rightarrow \infty$ ), estas equações descrevem os modelos. Podemos citar como exemplos clássicos as equações Edwards-Wilkinson (EW) [13] e Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [14].

---

<sup>2</sup>Equações com um ou mais termos que envolvem variáveis aleatórias (processos estocásticos). Os termos que compõem as equações estocásticas obedecem argumentos físicos e/ou princípios de simetria.

Os modelos discretos podem ser gerados em uma rede cubica/quadrada de dimensões  $L^3/L^2$  e as superfícies/perfis geradas/os após um tempo  $t$ , são representados por um conjunto discreto  $\{h_i(t)\}$ , representando a altura de um determinado sítio  $i$  num dado tempo  $t$ . A seguir, apresenta-se alguns modelos de crescimento discreto.

### 2.2.1 Deposição Randômica - DR

Este é o modelo de deposição mais simples. Neste modelo, o sítio em que a partícula será depositada é escolhido aleatoriamente e a mesma é eventualmente depositada sobre a partícula anterior que compõe o substrato (filme), incrementando a altura do sítio em uma unidade. Sendo assim,  $h_i(t + 1) = h_i(t) + 1$ . Deste modo, trata-se de um modelo descorrelacionado (figura 2.5).

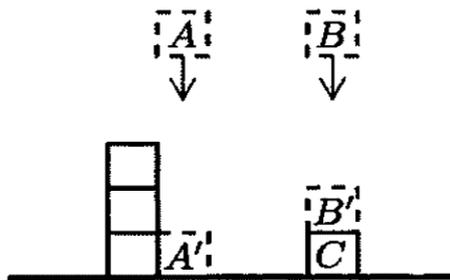


Figura 2.5: Situação que ilustra o processo de Deposição Randômica ou descorrelacionado.

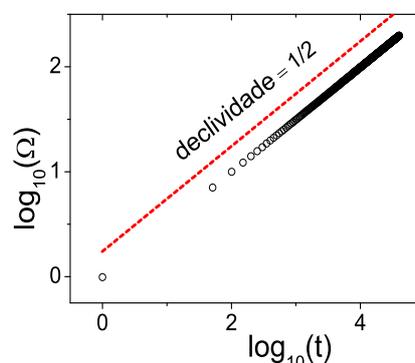


Figura 2.6: Os círculos representam dados da evolução temporal da rugosidade global simulados computacionalmente. A linha descontinua representa uma reta com declividade  $1/2$ .

Com os sítios descorrelacionados, a rugosidade global do sistema cresce indefinidamente com o tempo com declividade  $\beta = 1/2$  [2] (ver figura 2.6).

A figura 2.7 mostra a evolução temporal do processo de deposição, destacando a altura de cada sítio para distintos valores de  $t$ , mostrando o crescimento da rugosidade da interface.

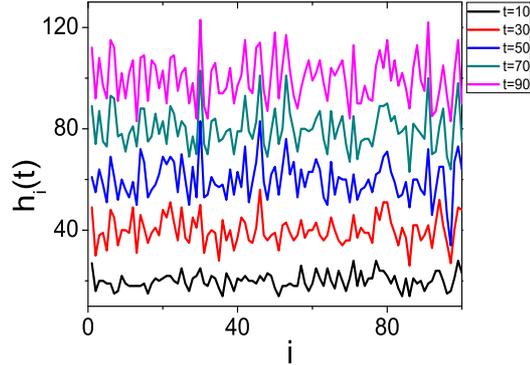


Figura 2.7: Evolução temporal de  $h_i(t)$  para  $L = 100$ , no modelo DR.

No limite hidrodinâmico, podemos descrever este modelo através da equação,

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

onde  $F$  representa o fluxo de partículas que chegam na interface e  $\eta(x, t)$  é um ruído, representando as flutuações aleatórias no processo de deposição. Como apenas a aleatoriedade influencia na escolha do sítio, o ruído é gaussiano e, com isto, possui média nula, ou seja,

$$\langle \eta(x, t) \rangle = 0 \quad . \quad (2.14)$$

Para que o mesmo seja descorrelacionado no espaço e no tempo, a covariância é dada por,

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = 2D \delta^d(x - x') \delta(t - t') \quad , \quad (2.15)$$

onde  $2D$  representa a amplitude do ruído.

Integrando a equação 2.13 com relação ao tempo tem-se,

$$h(x, t) = Ft + \int_0^t dt' \eta(x, t') \quad . \quad (2.16)$$

Para encontrar a relação entre a rugosidade global e o tempo, é necessário calcular os valores médios de  $h(x, t)$  e  $[h(x, t)]^2$ , sendo assim,

$$\langle h(x, t) \rangle = Ft + \int_0^t dt' \langle \eta(x, t') \rangle \quad (2.17)$$

e

$$\langle [h(x, t)]^2 \rangle = (Ft)^2 + 2Ft \int_0^t dt' \langle \eta(x, t') \rangle + \int_0^t dt' dt'' \langle \eta(x, t') \eta(x, t'') \rangle. \quad (2.18)$$

Utilizando as relações 2.14 e 2.15 nas equações 2.17 e 2.18, obtemos

$$\langle h(x, t) \rangle = Ft \quad , \quad (2.19)$$

e

$$\langle [h(x, t)]^2 \rangle = (Ft)^2 + 2Dt \quad . \quad (2.20)$$

Verifica-se que o resultado 2.19 corrobora a relação 2.2. A partir dos resultados 2.19 e 2.20, a equação 2.3 pode ser escrita como:

$$\Omega^2(t) = \langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 = 2Dt \quad . \quad (2.21)$$

verificando-se que  $\beta = 1/2$ .

Devido à ausência de correlação, não ocorre a saturação da rugosidade global, de modo que efeitos de tamanho finito não são esperados.

### 2.2.2 Deposição Randômica com Difusão (Modelo de Family) - MF

O primeiro modelo de deposição com difusão em filmes finos foi proposto por Family [15]. Neste modelo, após a escolha aleatória do sítio de deposição, é analisada a altura entre os vizinhos, ocorrendo o deslocamento da partícula para o sítio de menor altura. Caso os sítios vizinhos, ao sítio de deposição, tenham a mesma altura, é feita uma escolha aleatória para definir a qual sítio a partícula se deslocará. Esta procura pode ser limitada por uma vizinhança de tamanho  $l$ , sendo  $l$  o número máximo de sítios

que a partícula pode se deslocar em relação ao sítio de deposição. A figura 2.8 ilustra este processo de difusão para  $l = 1$ . Devido à difusão, os perfis gerados para pequenos valores de  $l$  são mais suaves em relação ao modelo DR, como mostra a figura 2.9.

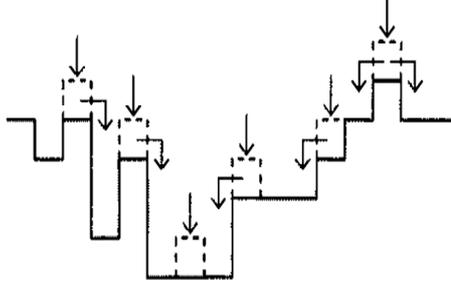


Figura 2.8: Imagem ilustrando o processo de deposição de Family.

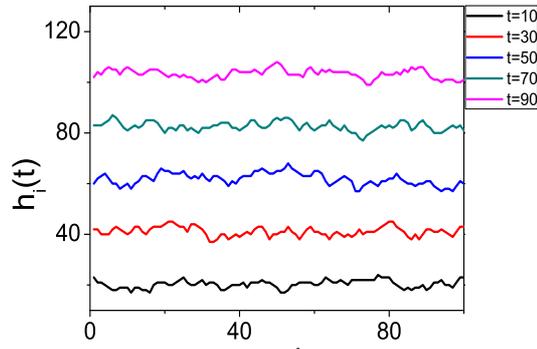


Figura 2.9: Evolução temporal de  $h_i(t)$  para  $L = 100$  com  $l = 1$ .

Como este modelo apresenta correlação, é necessário acrescentar um termo à equação 2.13 que descreva essa característica. Sendo assim, a equação obtida foi proposta por Edwards e Wilkinson [13] e é dada por,

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

onde  $\nu$  representa a tensão superficial e o termo  $\nu \nabla^2 h(x, t)$  é o responsável pela suavização da interface.

Para a determinação dos expoentes de escala existem dois caminhos: através de uma análise por argumentos de escala ou obtendo a solução exata. O segundo caminho é resolvido via transformadas de Fourier. Seguindo o primeiro caminho, como a velocidade de crescimento da interface é constante, é possível fazer uma mudança

de referencial sem afetar as propriedades de escala da interface, tal que

$$h \rightarrow h + vt \quad . \quad (2.23)$$

Assim, a equação 2.22 resulta

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

Se a interface  $h(x, t)$  é auto-afim,<sup>3</sup> a mesma pode ser reescalada na horizontal, tal que:

$$x \rightarrow x' \equiv bx \quad , \quad (2.25)$$

e, na vertical,

$$h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h \quad , \quad (2.26)$$

obtendo uma interface que é estatisticamente indistinguível da original. Faz-se também uma reescala temporal

$$t \rightarrow t' \equiv b^z t \quad . \quad (2.27)$$

Substituindo as transformações 2.25, 2.26 e 2.27 na equação 2.24, tem-se:

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

Na obtenção desta equação foi usada a propriedade da função delta para reescalar  $\eta$ ,

$$\delta^d(ax) = \frac{1}{a^d} \delta^d(x) \quad . \quad (2.29)$$

Multiplicando ambos os lados da equação 2.28 por  $b^{z-\alpha}$ , obtemos

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu b^{z-2} \nabla^2 h(x, t) + b^{-(\frac{d}{2} - \frac{z}{2-\alpha})} \eta(x, t) \quad . \quad (2.30)$$

---

<sup>3</sup>Objetos que são reescalados utilizando uma transformação anisotrópica em suas coordenadas ou, no caso de equações, transformações diferentes para cada variável.

Para que a equação 2.22 seja invariante às transformações 2.25, 2.26 e 2.27, os expoentes de  $b$  têm que ser nulos. Portanto,

$$z - 2 = 0 \quad , \quad (2.31)$$

$$\frac{d}{2} - \frac{z}{2 - \alpha} = 0 \quad . \quad (2.32)$$

e, a partir dos resultados 2.31 e 2.32 e utilizando a relação 2.10, obtém-se:

$$\alpha = \frac{2 - d}{2}, \quad \beta = \frac{2 - d}{4}, \quad z = 2 \quad . \quad (2.33)$$

Simulando o crescimento do modelos MF para  $d = 1$ , os expoentes críticos calculados são bem próximos dos valores teóricos,  $\beta_{EW} = 1/4$ ,  $\alpha_{EW} = 1/2$ , como é possível verificar nas figuras 2.10 e 2.11.

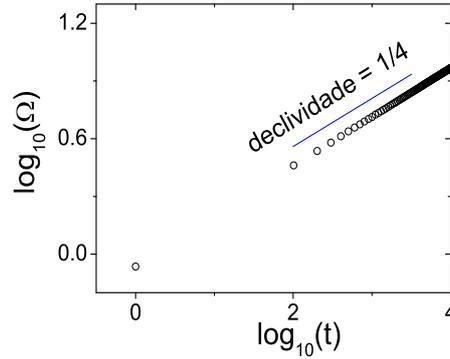


Figura 2.10: Os círculos representam dados da evolução temporal da rugosidade global, no MF, simulados computacionalmente. A reta contínua tem declividade 1/4.

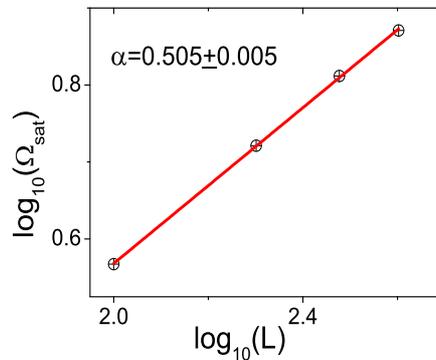


Figura 2.11: Valor estimado de  $\alpha$  para o modelo de Family.

Assim, diz-se que este modelo pertence à classe de universalidade EW.

### 2.2.3 Deposição Balística - DB

Este modelo foi introduzido em 1959 por Vold [16, 17] para simular a formação de estruturas sedimentares a partir da deposição de pequenas partículas em dispersão coloidal. Neste tipo de crescimento a partícula se agrega a interface após o primeiro contato lateral com uma partícula situada no primeiro sítio vizinho ao sítio da deposição (partícula A da figura 2.12). Desta forma, após escolhido aleatoriamente o  $i$ -ésimo sítio para a deposição da partícula, o mesmo só poderá ter uma altura igual ou maior a seu primeiro vizinho (figura 2.12).

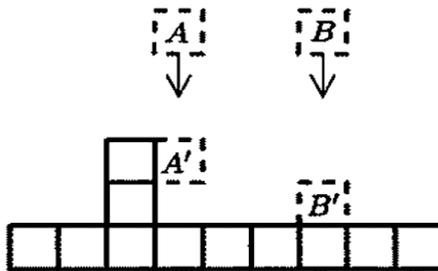


Figura 2.12: Imagem ilustrando o processo de Deposição Balística.

Este tipo de correlação permite a formação de poros no volume do filme, como mostra a figura 2.13 e uma velocidade de crescimento bem maior, se comparado com os modelos vistos anteriormente.

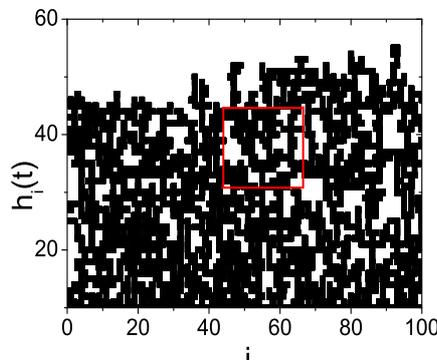


Figura 2.13: Processo de deposição iniciado a partir de um substrato plano para  $L = 100$  e  $t = 20$ , seguindo o modelo DB. Destaca-se (quadrado vermelho) o crescimento lateral, ou seja, a propagação lateral da informação da altura dos sítios vizinhos.

Comparando as figuras 2.14 com 2.7(DR) e 2.9(MF) é possível notar que, para tempos iguais, a altura dos sítios do modelo balístico é maior do que nos demais.

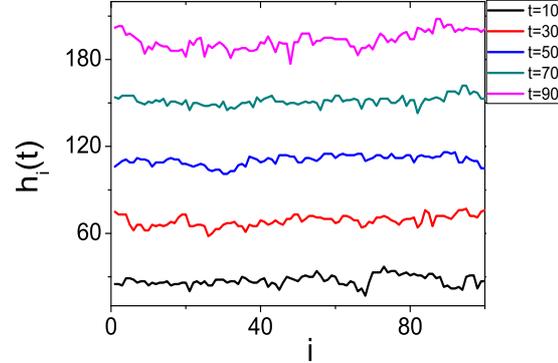


Figura 2.14: Evolução temporal de  $h_i(t)$  para  $L = 100$ , no modelo DB.

Existe uma diferença importante entre os modelos MF e DB. No modelo MF as partículas chegam aos sítios e ocorre uma relaxação antes de se fixarem na superfície. Já no modelo BD as partículas se fixam ao substrato após o primeiro contato lateral. Vários modelos, bem como a DB, não são descritos por uma equação linear. Com isso, Kardar-Parisi-Zhang propuseram o acréscimo de um termo não linear [14] à equação EW, construindo então a denominada equação KPZ, que é dada por

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(x, t) + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(x, t) \quad . \quad (2.34)$$

Para  $d = 1$  os valores dos expoentes críticos são obtidos através de técnicas de grupo de renormalização [2, 14], resultando em  $\beta = 1/3$ ,  $\alpha = 1/2$  e  $z = 3/2$  [18]. Após a simulação de um processo de crescimento seguindo o modelo balístico para  $d = 1$ , foram estimados os valores dos expoente críticos,  $\beta$  e  $\alpha$ , mostrados nas figuras 2.15 e 2.16, respectivamente. Com isto, os resultados indicam que este modelo pertence à classe de universalidade KPZ, como já foi previsto em trabalhos anteriores [2].

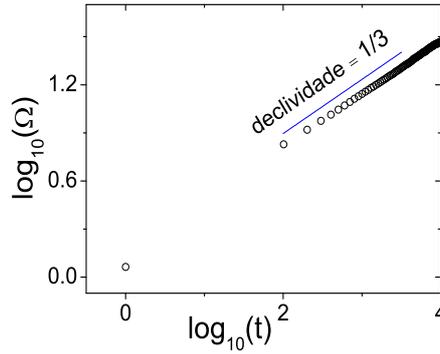


Figura 2.15: Os círculos representam dados da evolução temporal da rugosidade global simulados computacionalmente, seguindo o modelo DB, para  $L = 10^6$ . A reta contínua tem declividade  $1/3$ .

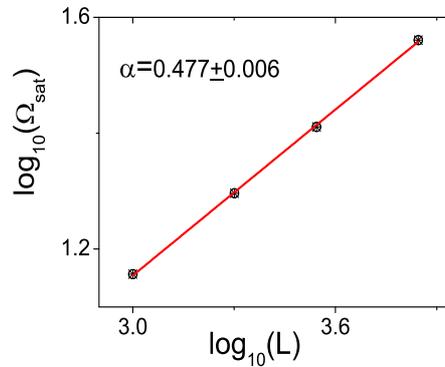


Figura 2.16: Valor estimado para  $\alpha$ , no modelo DB.

## 2.2.4 Deposição Restricted Solid On Solid - RSOS

O modelo RSOS foi proposto por Kim e Kosterlitz [19]. Uma das características destes modelos é a restrição a grandes flutuações entre as alturas dos sítios, evitando assim a formação de *overhangs* e impossibilitando a formação de poros nas superfícies geradas (figura 2.18). Com isto, a partícula só é adsorvida se a condição  $|\Delta h(i, t)| = |h(i, t) - h(i \pm 1, t)| \leq M$  for satisfeita, onde  $M$  é um parâmetro que controla a inclinação local. Neste caso consideramos  $M = 1$ .

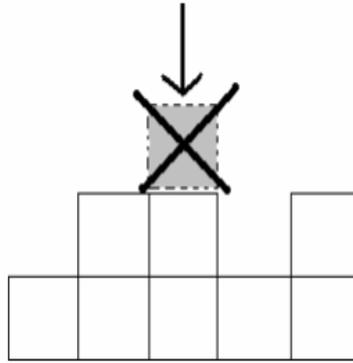


Figura 2.17: Situação ilustrativa representando um processo de deposição seguindo a regra local RSOS. Neste exemplo, a diferença de altura entre os sítios não pode ultrapassar uma unidade de magnitude, caso contrário a partícula não se fixa ao substrato.

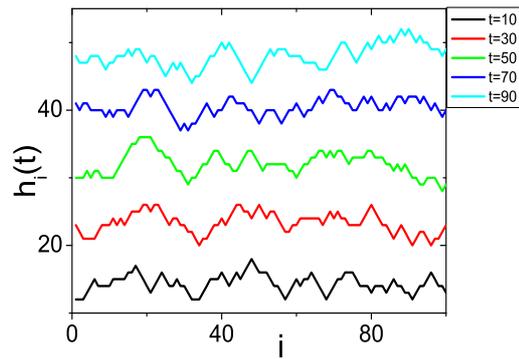


Figura 2.18: Evolução temporal de  $h_i(t)$  para  $L = 100$ , no modelo RSOS.

As figuras 2.19 e 2.20 mostram os valores estimados dos expoentes críticos obtidos através da simulação. Os resultados são bem próximos dos valores calculados teoricamente da equação KPZ ( $\beta = 1/3$ ,  $\alpha = 1/2$  e  $z = 3/2$ ).

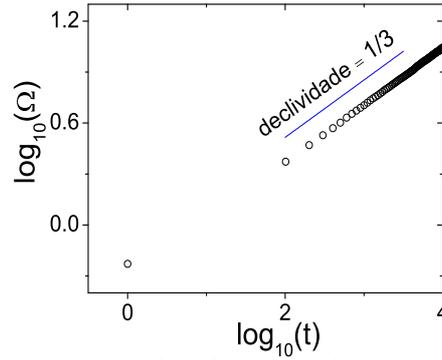


Figura 2.19: Os círculos representam dados da evolução temporal da rugosidade global simulados computacionalmente, no modelo RSOS, para  $L = 10^6$ . A reta contínua declividade  $1/3$ .

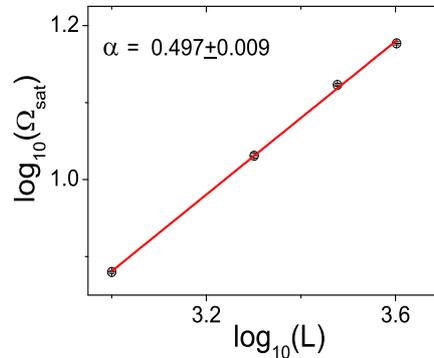
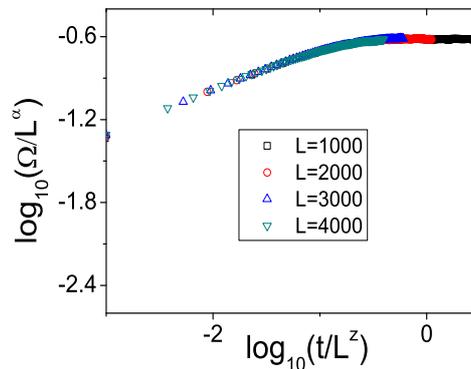


Figura 2.20: Valor estimado para  $\alpha$  no modelo RSOS.

Com o colapso das curvas, visto na figura 2.21, verifica-se que o modelo segue a relação de *Family – Vicsek*. Com isto, os resultados indicam que o modelo RSOS pertence à classe de universalidade KPZ, como foi igualmente encontrado em trabalhos anteriores [2, 19, 20].



Descritos alguns modelos discretos de crescimento, a tabela abaixo apresenta os valores característicos dos expoentes de escala de cada um dos modelos apresentados anteriormente.

	$\alpha$	$\beta$	$z$
DR	não definido	1/2	não definido
MF	1/2	1/4	2
DB	1/2	1/3	3/2
RSOS	1/2	1/3	3/2

Tabela 2.1: Tabela comparativa entre os valores dos expoentes de escala dos distintos modelos discretos de crescimento.

## 2.3 Distribuição de Alturas

Os processos de crescimento levam a uma grande variedade de padrões. Até este ponto somente através da determinação do valor dos expoentes de escala, identificamos a que classe de universalidade o modelo pertence. Logo após a equação KPZ ser proposta por Kardar, Parisi e Zhang em 1986 [14], uma análise de teoria de escala, voltada para a equação KPZ, se iniciou. Mas esta análise está relacionada a apenas uma das linhas de investigação sobre a equação KPZ. Existem outras quantidades matemáticas que apresentam características universais e com isso são também capazes de identificar a classe de universalidade de um determinado modelo. Desde o início da década de 90, uma análise da função distribuição de alturas dos perfis começou a ser feita. Em um dos trabalhos, Kim *et al.*, simularam o modelo de polímeros direcionados e encontraram a distribuição de alturas equivalente à distribuição obtida para o modelo balístico [21]. Cálculos de quantidades estatísticas que medem a simetria de uma distribuição também foram feitos para outros modelos de crescimento [22, 23].

Uma descrição analítica e exata das estatísticas associada à equação KPZ ficou inteiramente desconhecida até próximo à virada do último século. No ano de 1999 Johansson publicou um trabalho [24] mostrando que a forma da distribuição de alturas escaladas, encontrada por meio da simulação do modelo de crescimento RSOS, surpreendentemente convergia para a distribuição Tracy-Widom<sup>4</sup> (TW), a qual emerge da teoria de matrizes aleatórias. Em 2000 Prähofer e Spohn [26], simulando o crescimento polinuclear, estudaram a distribuição de alturas para diferentes condições

---

<sup>4</sup>Duas das formas da distribuição TW apareceram nas análises das distribuições das alturas escaladas. Uma proveniente do conjunto Gaussiano Ortogonal (Gaussian Orthogonal Ensemble - GOE) e a outra forma que obedece o Conjunto Gaussiano Unitário (Gaussian Unitary Ensemble - GUE)[25].

iniciais de crescimento utilizando interfaces lineares e circulares. Com isso, verificaram a convergência das distribuições encontradas para a distribuição TW. Para a condição inicial circular, a distribuição apresentou a forma da distribuição TW (GUE) e para a condição inicial linear, a distribuição das alturas assume a forma da distribuição TW (GOE). T. Sasamoto também se dedicou a estudar esta relação entre a teoria de matrizes aleatórias e processos de deposição, como pode ser visto em dois de seus trabalhos [28, 29]. Os trabalhos correspondentes às referências [24, 26, 27] conjecturaram uma mesma solução para os modelos e, com isso, identificaram como a distribuição TW está relacionada com o processo de deposição. Para um substrato infinito a evolução de  $h(x, t)$  e  $d = 1$ , para limite de longos tempos,  $t \gg 1$ , [30] é descrita pelo *ansatz*,

$$h(x, t) = t \left[ v_\infty \pm \left( \frac{\Gamma_\infty}{t^2} \right)^{\frac{1}{3}} \chi_{TW} \right] \quad , \quad (2.35)$$

onde  $v_\infty$  indica a velocidade de crescimento da interface e  $\Gamma_\infty$  está relacionado com o parâmetro  $\lambda$  que dependem do modelo de crescimento.  $\chi_{TW}$  representa a distribuição TW. Como previsto, através do expoente de crescimento, a flutuação das alturas escala com o tempo por  $t^{1/3}$ .

No entanto, para sistemas reais finitos, a equação 2.35 vale apenas para a região de crescimento da interface, i.e., quando  $1 \ll t \ll t_x$ . Sendo assim, é possível reescrevê-la,

$$h_i(t) = t \left[ v_\infty \pm \left( \frac{\Gamma_\infty}{t^2} \right)^{\frac{1}{3}} q \right] \quad , \quad (2.36)$$

sendo  $q$  uma variável aleatória independente do tempo, usada para comparação entre as estimativas numéricas simuladas das alturas escaladas,  $\rho(q)$ , e a solução analítica da equação KPZ,  $\rho(\chi_{TW})$  [30, 26]. A partir da equação 2.36 isola-se  $q$ , tal que,

$$q = \frac{h v_\infty t}{[\Gamma_\infty t]^{\beta_{KPZ}}} \quad . \quad (2.37)$$

Os valores dos  $q$  são universais, porém os parâmetros  $v_\infty$  e  $\Gamma_\infty$  dependem do modelo estudado. Primeiro, estimaremos o valor de  $v_\infty$ , que está relacionado com  $\lambda$

da equação KPZ. Sendo a dinâmica da interface governada pela equação KPZ, a velocidade média em uma dada escala  $l$ , não considerando a influência de forças externas, é dada por  $v = \frac{\lambda}{l} \int_0^l dx \sqrt{(1 + \nabla h)^2}$ . Assumindo  $(\nabla h)^2 \ll 1$ ,  $v \approx \lambda + \frac{\lambda}{2l} \int_0^l dx (\nabla h)^2$ . Se existe uma inclinação média  $m = \langle \nabla h \rangle$  dentro do intervalo de comprimento  $l$ , então a velocidade de crescimento da interface dentro desse intervalo é aproximadamente  $v(m) \approx \lambda + (\frac{\lambda}{2})m^2$ . Esse  $v(m)$  é portanto a velocidade dependente da inclinação que deve ser observada na escala  $l$ , escala esta chamada de *coarse-grained* (granulado-grosso). Assim  $v_\infty = v(m=0) = |\lambda|$  [23, 31]. A partir da equação 2.36 obtemos,

$$\frac{d\langle h \rangle}{dt} \approx v_\infty + ct^{-\frac{2}{3}} \quad , \quad (2.38)$$

onde  $c$  é uma constante, sendo possível estimar o valor do  $v_\infty$ .

Calculando o cumulante de segunda ordem (variância),

$$\Omega^2(t) \simeq (\Gamma t)^{\frac{2}{3}} \langle \chi^2 \rangle_c \quad , \quad (2.39)$$

estima-se o valor de  $\Gamma_\infty$ . Sendo esta quantidade, a que nos dá um valor mais confiável do  $\Gamma_\infty$ , que depende de como  $\langle \chi^2 \rangle_c$  é normalizado. Foi considerado  $\langle \chi^2 \rangle_c$  como uma variável da GOE da distribuição TW ( $\sim 0.63805$ ) [26, 32].

Evidências experimentais começaram a ser obtidas, por exemplo, o estudo da classe de universalidade para crescimento em filmes finos de nitrato de ferro [34] e na análise da função distribuição de alturas, após a combustão lenta, em uma folha papel [33, 35]. Estas evidências experimentais apareceram antes da solução exata da equação KPZ, para  $d = 1$ , a qual só foi obtida em 2010 por Sasamoto e Spohn [36], confirmando as previsões numéricas e experimentais. Logo após a publicação da solução exata, um outro experimento, agora relacionado com crescimentos de cristais líquidos, obteve valores dos expoentes críticos e das quantidades estatísticas, característicos de fenômenos pertencentes à classe de universalidade KPZ [37, 38]. A mais nova evidência experimental analisa a influência da forma das partículas na dinâmica de crescimento do substrato gerado nas extremidades de uma gota, devido à sua evaporação [39]. Neste trabalho também foi encontrado valores de *skewness* e *kurtosis*

característicos da distribuição TW.

No estudo de distribuição de dados, os coeficientes de assimetria, *skewness* e *kurtosis*, apresentam valores que caracterizam a forma de cada distribuição, as quais são definidas através de razões entre cumulantes. Porém, em simulações, são calculados os momentos das distribuições, tornando necessário encontrar a relação existente entre os mesmos.

Considerando uma variável aleatória  $x$  e sendo  $p(x)$  a densidade de probabilidade associada a  $x$ . Os momentos de ordem  $n$  são definidos por:

$$\mu_n = \langle x^n \rangle = \int_{\Psi} x^n p(x) dx \quad , \quad (2.40)$$

onde  $\Psi$  é o espaço amostral<sup>5</sup> de  $p(x)$ . A distribuição é caracterizada pelo conjunto de seus momentos, como mostraremos a seguir.

A função geratriz  $g(k)$  é definida através da transformada de Fourier da densidade de probabilidade [40], tal que,

$$g(k) = \int_{\Psi} p(x) e^{ikx} dx \quad . \quad (2.41)$$

Desenvolvendo em série de Taylor, tem-se

$$g(k) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \mu_n \quad . \quad (2.42)$$

A função característica também gera os cumulante  $Y_n$ , definidos por:

$$g(k) = \exp \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} Y_n \right) \quad . \quad (2.43)$$

Igualando-se os logaritmos de 2.42 e 2.43, tem-se:

$$\ln \left( 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \mu_n \right) = \exp \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} Y_n \right) \quad , \quad (2.44)$$

---

<sup>5</sup>Para este trabalho o espaço amostral são os valores das alturas associadas a cada sítio.

e expandindo o logaritmo em série de Taylor<sup>6</sup>, é possível obter as relações entre os momentos  $\mu_n$  e os cumulantes  $Y_n$ , reagrupando os termos em ordem das potências de  $(ik)$  [41], tais que:

$$Y_1 = \langle Y^1 \rangle = \mu_1 \quad (2.45)$$

$$Y_2 = \langle Y^2 \rangle = \mu_2 - \mu_1^2 \quad (2.46)$$

$$Y_3 = \langle Y^3 \rangle = \mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 2\mu_1^3 \quad (2.47)$$

$$Y_4 = \langle Y^4 \rangle = \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2^2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4 \quad (2.48)$$

Com isso, é possível definir a *skewness*

$$S = \frac{\langle Y^3 \rangle}{\langle Y^2 \rangle^{3/2}} \quad (2.49)$$

Ao assumir valor nulo, a distribuição é simétrica em relação à média. Se a distribuição cair mais lentamente para valores acima da média, a *skewness* assume valores positivos. Caso contrário, a *skewness* assume valores negativos.

A *kurtosis* é definida por

$$K = \frac{\langle Y^4 \rangle}{\langle Y^2 \rangle^2} \quad (2.50)$$

Esta quantidade estatística mede como os pontos da distribuição caem para pontos próximos ao ponto de máximo. Se caem mais lentamente, em comparação à distribuição gaussiana, a *kurtosis* assume valores negativos, caso contrário, a *kurtosis* é positiva. Ou seja, a *kurtosis* expressa o “peso” das caldas sobre a distribuição.

Como estamos trabalhando com processos de deposição, estes dados são as alturas associadas a cada sítio. Os cumulantes das distribuições de alturas são definidos por  $\langle h^n \rangle_c$  e os momentos dados por,  $\delta h \equiv h - \langle h \rangle$ . Deste modo, fazendo ( $n = 2, 3$  e  $4$ ) onde, o segundo, terceiro e quarto cumulantes são, respectivamente,  $\langle h^2 \rangle_c = \langle \delta h^2 \rangle = \Omega(t)^2$ ,  $\langle h^3 \rangle_c = \langle \delta h^3 \rangle$  e  $\langle h^4 \rangle_c = \langle \delta h^4 \rangle - 3\langle \delta h^2 \rangle^2$  [37].

---

<sup>6</sup> $\ln(1+x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n+1} x^{n+1}$ .

Sendo assim, a *skewness* é dada por:

$$S = \frac{\langle h^3 \rangle_c}{(\langle h^2 \rangle_c)^{3/2}} \quad , \quad (2.51)$$

e a *kurtosis*,

$$K = \frac{\langle h^4 \rangle_c}{(\langle h^2 \rangle_c)^2} \quad . \quad (2.52)$$

Resultados numéricos, experimentais e analíticos construíram fortes evidências para uma robustez da classe de universalidade de sistemas fora do equilíbrio. Assim, com base em todos estes estudos prévios, verifica-se que, para classificar com mais informações morfológicas um modelo ou fenômeno físico na classe de universalidade KPZ, são calculados os expoentes de escala, verificando se, na região de crescimento, que o modelo segue o *ansatz* 2.36. De posse das alturas escaladas, é possível calcular as quantidades estatísticas, cumulantes, *skewness*, *kurtosis*.

Então, comparando os expoentes críticos simulados com  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $z$  teóricos e se os valores das quantidades estatísticas concordarem com os valores da distribuição Tracy-Widom [26] o modelo e/ou fenômeno indica fortemente ser classe de universalidade KPZ.

No próximo capítulo serão apresentados os resultados destas sequências de análises para um modelo competitivo (BD + RSOS). Os estudos prévios tanto do modelo BD quanto do modelo RSOS sugerem que, individualmente são pertencentes à classe de universalidade KPZ. No entanto, o modelo BD tem a constante não linear da equação KPZ,  $\lambda$ , positivo [18] e o modelo RSOS um  $\lambda$  negativo [19]. Este modelo foi introduzido por Silva e Moreira [42]. Apenas a análise das propriedades de escala e o cálculo da *skewness*, foram estudadas anteriormente. A originalidade deste trabalho consiste portanto no fato expandir a investigação deste modelo competitivo ao *ansatz* 2.35.

## Capítulo 3

# Resultados - Aspectos Morfológicos

Modelos de crescimento de superfícies, com regras locais muito diferentes, podem compartilhar, por exemplo, mesmos expoentes de escala e similar dinâmica de crescimento. Fato que ocorre, por exemplo, com os modelos de deposição RSOS e Balística. Apesar de possuírem regras locais distintas, no limite do contínuo, estes modelos são descritos pela equação KPZ [43], com valores de  $\lambda$  de sinais opostos. Mas, como visto anteriormente, ambos os sistemas possuem os mesmos valores para os expoentes críticos,  $\alpha = 1/2$  e  $\beta = 1/3$  [2], indicando pertencerem à mesma classe de universalidade. Esta característica, contudo, pode levar, no caso de um crescimento que resulte da competição destes modelos, a características interessantes como, por exemplo, a presença de um *crossover* entre classes de universalidades.

Neste capítulo será apresentada uma análise morfológica de interfaces crescidas, considerando  $d = 1$ , para tal modelo competitivo. Nossas simulações foram realizadas considerando uma rede quadrada, com uma quantidade  $i$  de sítios,  $i \in [1, L]$ . Em  $t = 0$ , tem-se um substrato linear sem irregularidades. As partículas são depositadas balisticamente em diferentes colunas  $i$  escolhidas aleatoriamente. Os perfis são descritos por uma função de  $h = h_i(t)$ , que identifica a altura  $h$  de cada coluna  $i$  ocupada pelas partículas, onde uma unidade de tempo vale  $L$  partículas depositadas. Durante cada deposição, a partícula é liberada em uma posição  $(i, h')$ ,  $h' > h_{max}(t)$ , de maneira aleatória. Aqui,  $h_{max}(t)$  representa o maior valor de  $h$  que é ocupado por um elemento de massa em um tempo  $t$ . Após a escolha aleatória do sítio da deposição um

parâmetro de controle  $p$  (probabilidade) indicará qual modelo de deposição a partícula será depositada. Um número aleatório será gerado e se o mesmo for menor ou igual a  $p$ , a partícula segue regra de deposição RSOS, caso contrário (uma probabilidade  $r = 1 - p$ ) o modelo de deposição balística.

Este capítulo será dedicado ao estudo da morfologia de perfís rugosos que resultam do processo de deposição conforme descrito anteriormente. Primeiramente, na secção 3.1, apresentar-se-ão as propriedades de escala para perfís crescidos com distintos valores de  $p$ . A seguir, nas secções 3.2 e 3.3, serão apresentados os resultados da análise estatística das distribuições das alturas escaladas dos perfís rugosos, para  $t \leq 2 \times 10^4$  monocamadas. Finalmente, as conclusões dos resultados encontram-se na secção 3.4.

### 3.1 Propriedades de Escala

As simulações de crescimento dos perfís se dão através de realizações de simulações tipo Monte-Carlo, com substratos de comprimentos  $L \in [10^3, 10^6]$ . Este intervalo para  $L$  é necessário de modo a possibilitar encontrar os valores assintóticos para os expoentes de crescimento e também analisar o efeito de tamanho finito dos modelos estudados. Este é um dos efeitos que causam uma discrepância entre os valores dos expoentes de crescimento globais ( $\beta$ ) calculados e teóricos. Existe, no entanto, uma dificuldade no cálculo do  $\beta$ , pois é necessário um critério para se estabelecer os limites da região de crescimento,  $\Omega(t) \sim t^\beta$ , para cada sistema de tamanho  $L$ . Diante do cuidado para estimar o expoente de crescimento no intervalo correto, dividiu-se o método de estimativa dos limites do intervalo de crescimento em 3 etapas:

(i) Primeiramente, é feito um ajuste na curva  $\log_{10}(\Omega) \times \log_{10}(t)$ , usando uma função polinomial (figura 3.1);

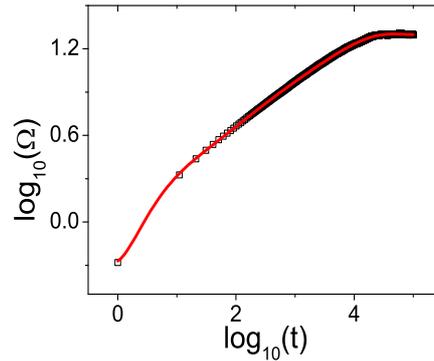


Figura 3.1: Os pontos retratam a evolução temporal da rugosidade de um perfil com  $p = 0.6$  e  $L = 2000$ . A curva contínua corresponde à função polinomial.

(ii) Calcula-se então a primeira derivada da função polinomial e analisa-se o intervalo de pequenas variações em relação aos outros intervalos da função para definir os limites da região de crescimento (figura 3.2);

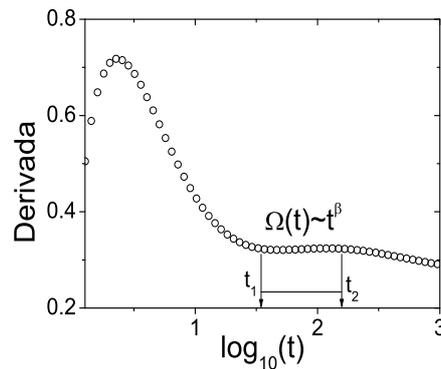


Figura 3.2: Evolução temporal da primeira derivada da função polinomial obtida na etapa (i), usando-se os resultados da figura 3.1.

(iii) Definido o intervalo de crescimento, estima-se o valor de  $\beta$ .

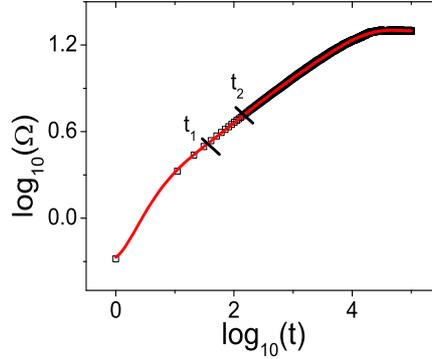


Figura 3.3: Em destaque, a região de crescimento, intervalo  $[t_1, t_2]$ , determinado pela etapa (ii), do perfil utilizado na etapa (i).

Utilizando este método para o cálculo do expoente de crescimento de todos os perfis, é necessário ainda identificar o efeito de tamanho finito sobre os valores obtidos. Com isto, foi feito um estudo da dependência de  $\beta$  em função de  $L$  ( $\beta_L$ ), para distintas probabilidades. Na figura 3.4, é clara a diferença entre o  $\beta_L$  ( $L < 6 \cdot 10^4$ ) e o  $\beta$  teórico ( $\beta_{KPZ}$ ), devido o efeito de tamanho finito. Mas, se assumirmos  $\beta_L = \beta_o(1 - L^{-\gamma})$ , encontramos, por exemplo, para  $p = 0$  (DB),  $\beta_o = 0.338 \pm 0.003$  e  $\gamma = 0.250 \pm 0.009$ , concordando com [45, 18].

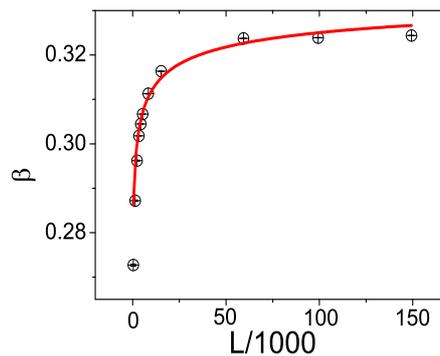


Figura 3.4: Dependência de  $\beta$  com  $L$  para  $p = 0$ . Os pontos do gráfico são os valores encontrados para o expoente de crescimento para alguns  $L$ . A linha contínua representa o ajuste,  $\beta_L = \beta_o(1 - L^{-\gamma})$ .

Seguindo todos estes passos, estimamos os valores dos  $\beta_L$  para diferentes valores de  $p \in [0, 1]$  e tempos máximo de deposição de  $2 \times 10^4$  monocamadas. A tabela abaixo

mostra alguns dos valores estimados.

p	0.1	0.3	0.6	0.7	0.75	0.8	0.83	0.85	0.87	0.90	0.95
$\beta_L$	0.329	0.322	0.325	0.325	0.323	0.290	0.266	0.270	0.319	0.323	0.332
Erro	0.003	0.002	0.002	0.001	0.004	0.003	0.005	0.001	0.001	0.001	0.002

Tabela 3.1:  $\beta_L$  para distintos valores de  $p$ .

Observando a tabela 3.1, verifica-se que para valores de  $p \leq 0.75$  e  $0.9 \leq p \leq 1$ , os  $\beta_L$  assumem valores próximos aos  $\beta_{KPZ}$ . Quando  $p = 0.83$ , o expoente de crescimento assume valor próximo àquele característico de modelos lineares ( $\beta_{EW} = 1/4$ ). Estes resultados, concordando com os valores obtidos por Silva [42], sugerem que para este modelo existe uma transição de classes de universalidade KPZ-EW-KPZ, no intervalo  $0.75 < p < 0.9$  com  $p \approx 0.83$  sendo o ponto crítico.

Em seguida, foi calculado o valor do expoente de rugosidade ( $\alpha$ ) para verificar se concordam com os valores teóricos da equação KPZ ( $\alpha_{KPZ}$ ).

p	0.1	0.3	0.6	0.90
$\alpha$	0.483	0.490	0.481	0.501
Erro	0.002	0.002	0.007	0.003

Tabela 3.2: Valores estimados de  $\alpha$  para distintos valores de  $p$ .

Analisando a tabela 3.2, é possível verificar que os valores de  $\alpha$  encontrados são próximos dos valores  $\alpha_{KPZ}$ , para sistemas com probabilidades em que se verifica  $\beta_L \approx \beta_{KPZ}$ . Não foram estimados os valores de  $\alpha$  no intervalo de  $0.75 < p < 0.9$  pois, para modelos competitivos que apresentam um intervalo de transição entre as classes de universalidades EW-KPZ, é esperado que para  $t \ll t_x$ , sendo  $t_x$  o tempo de saturação da rugosidade, o sistema apresente características de crescimento EW seguido de um *crossover*, no tempo  $t_c$ , para características KPZ, quando o caráter não linear do modelo passa a ter uma influência maior sobre as propriedades macroscópicas do sistema. Deste modo, quando analisa-se a evolução temporal da rugosidade, para sistemas com valores de  $p$  pertencentes ao intervalo de transição, observa-se um crescimento seguindo a lei de potência, com expoente de crescimento característico de modelos lineares, seguido do *crossover* para um crescimento característico de modelos KPZ e, em seguida, ocorre a saturação da rugosidade (ver gráfico 3.5).

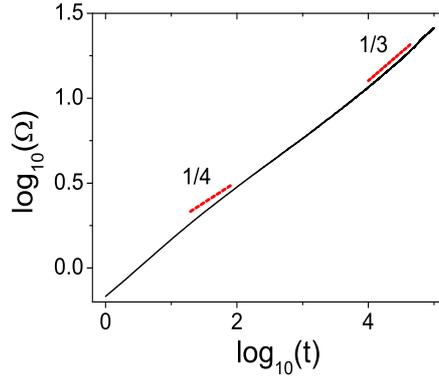


Figura 3.5: A curva contínua representa a evolução temporal da rugosidade global para  $p = 0.8$  e  $L = 10^6$ . As linhas tracejadas são retas com suas respectivas inclinações, as quais ajudam na visualização da região de crescimento característica de modelos lineares, seguido de um crescimento KPZ.

Logo, devido a este comportamento da evolução temporal da rugosidade global, os valores encontrados para os expoentes de crescimento de sistemas com valores de  $p$  neste intervalo, são em consequência do efeito de tempo finito, exceto para  $p \approx 0.83$ . Já o cálculo dos expoentes de rugosidade se torna inviável, devido ao longo tempo de deposição necessário para ocorrer a saturação. Por exemplo, a evolução temporal da rugosidade global no gráfico 3.5 que, mesmo para  $t = 10^5$ , não demonstra que está próximo de ocorrer a saturação. Como para  $p \approx 0.83$  o sistema apresenta uma dinâmica de crescimento cada vez mais próxima dos modelos lineares, a constante do termo não linear da equação KPZ ( $\lambda$ ) é cada vez menor e, com isto, para pequenos valores de  $\lambda$ , uma relação prevista teoricamente entre o *crossover* e  $\lambda$ , tem influência relevante na evolução do sistema, tal que,  $t_c \sim \lambda^{-\varphi}$ , sendo  $\varphi$  um expoente de *crossover* universal  $\varphi = 4$  [46, 47, 48, 49]. Numericamente, os primeiros valores encontrados para  $\varphi$  eram próximos de 3. Somente no trabalho realizado por Oliveira *et. al* [50], foi estimado numericamente o valor de  $\varphi$ , que concordava com a previsão teórica.

De posse dos expoentes críticos, para  $p$  fora do intervalo de transição, foi verificado se os perfis gerados obedecem à relação de escala de *Family – Vicsek*. Os gráficos da figura 3.6 mostram os resultados das transformações de escala usando os valores teóricos de  $\alpha$  e  $\beta$ .

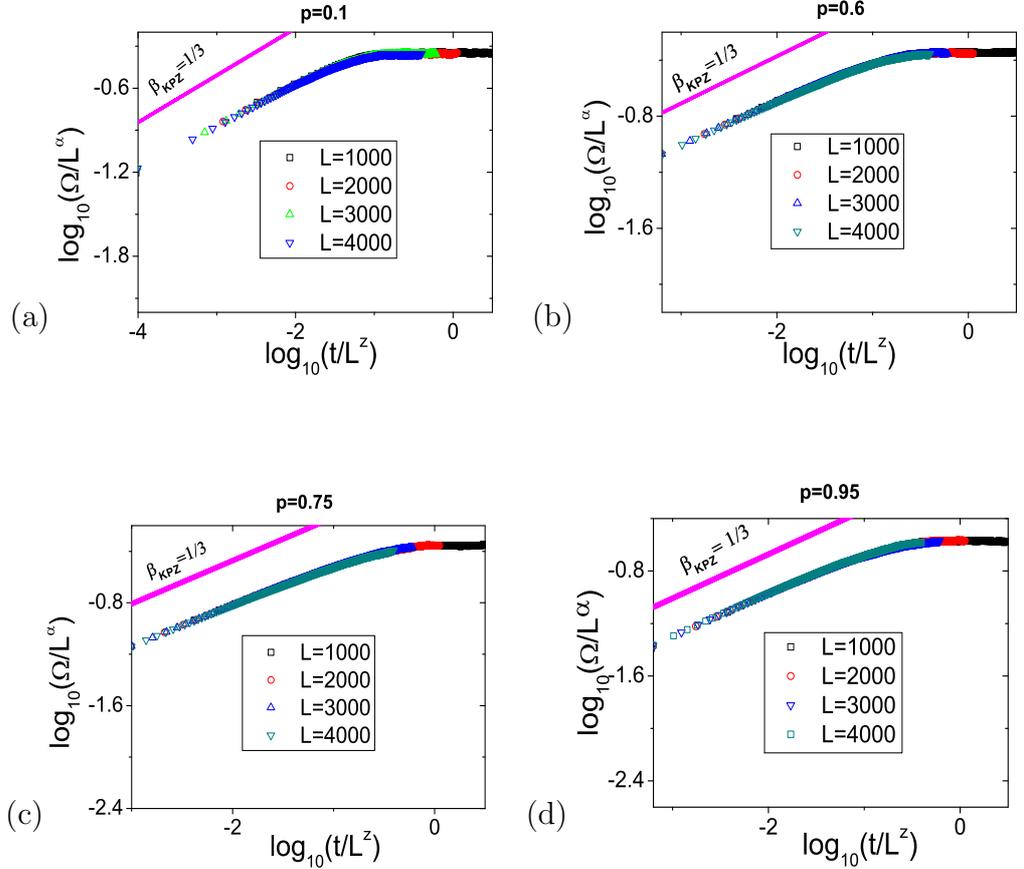


Figura 3.6: Transformação de Family-Vicsek para (a)  $p = 0.1$ , (b)  $0.6$ , (c)  $0.75$  e (d)  $0.95$ , usando os expoentes críticos da equação KPZ para  $d = 1$ .

Os resultados sugerem a não existência de escala anômala, indicando que os perfis são auto-afins, seguindo a relação de escala de *Family – Vicsek*. Esta auto-afinidade foi observada em dois intervalos de  $p$ ,  $I_B = [0, 0.75]$  e  $I_R = [0.9, 1]$ . No intervalo de transição,  $I_T = (0.75, 0.9)$ , os valores de  $\beta$  são diferentes de  $\beta_{KPZ}$  devido ao efeito de tempo finito, exceto quando  $p \approx 0.83$ . Estudos anteriores mostraram que  $\beta \approx 0.27$ , quando  $p \approx 0.83$ , valor este próximo do encontrado em modelos lineares [51]. Nossas simulações indicaram que para  $p \approx 0.83$  com  $L = 10^6$  e  $t = 2 \cdot 10^4$ , o valor estimado do expoente de crescimento global foi,  $\beta \approx 0.26$ .

Estimar os limites da região de crescimento para cada perfil também tem grande importância quando analisamos as distribuições das flutuações de alturas para sistemas de tamanho finito, uma vez que, para tempos além da região de crescimento, a distribuição das flutuações de alturas tende a uma distribuição gaussiana [44]. At-

ravés da estimativa da *skewness* e *kurtosis*, por exemplo, para perfís com valores de  $p = 0.3$  e  $0.95$  para  $L = 10^3$ , verificou-se o comportamento destas quantidades, obtidas para  $t \gg L^z$ , como mostrado na figura 3.7. A *skewness* vai para zero, mostrando que a distribuição das alturas se torna simétrica. Por outro lado, a *kurtosis* assume um valor negativo devido ao crescimento lateral do modelo balístico e à diferença de alturas entre os vizinhos ser limitada a uma unidade de magnitude da altura, regra proveniente do modelo RSOS. Com isto, tornando a distribuição de alturas com mais sítios com alturas próximas à altura máxima.

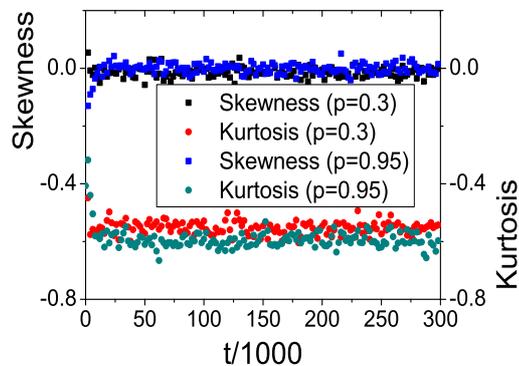


Figura 3.7: Evolução temporal da *skewness* (quadrados) e *kurtosis* (círculos) de perfís com valores de  $p = 0.3$  e  $0.95$  e comprimento  $L = 10^3$ .

## 3.2 Distribuição de Alturas: Regime não-linear

Feita a análise de escala dos perfís, analisaremos agora a distribuição das alturas escaladas, na região de crescimento, para os três intervalos:  $I_B$ ,  $I_T$  e  $I_R$ . Como visto na secção 2.3, é necessário estimar primeiro o valor dos parâmetros não universais,  $v_\infty$  e  $\Gamma_\infty$ , para cada probabilidade.

Utilizando a relação 2.38 para estimar o valor de  $v_\infty$ , para  $t \leq 2 \times 10^4$  monocamadas, é feito um gráfico de  $d\langle h \rangle / dt \times t^{-2/3}$ , sendo  $v_\infty$  o coeficiente linear da reta, mostrada no gráfico interno da figura 3.8.

Os resultados indicam que  $v_\infty$  decai linearmente com  $p$  no intervalo  $I_B$ . Para  $p \in I_T$ , não é possível estimar o valor de  $v_\infty$ , pois o comportamento da relação 2.38 deixa de ser linear devido ao efeito de tempo finito. Esta quebra do regime linear é mostrada

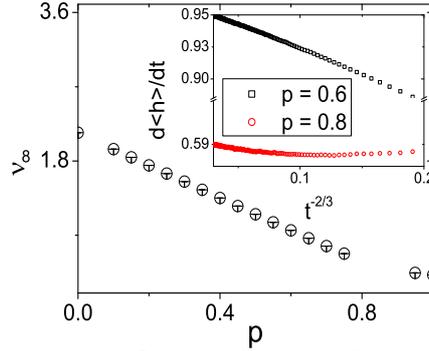


Figura 3.8: Velocidade de crescimento da interface em função da probabilidade. Para os valores limites de  $p$ ,  $v_\infty(p = 0) = 2.142(7)$  e  $v_\infty(p = 1) = 0.4191(4)$ . O gráfico interno  $(d\langle h \rangle / dt \times t^{-2/3})$  reproduz a estimativa de  $v_\infty$  para  $p = 0.6$  e  $p = 0.8$ . Sendo que, para esta segunda probabilidade, o *ansatz* 2.38 não é válido, devido o efeito de tempo finito, para perfis que possuem  $p \in I_T$ .

também no gráfico interno da figura 3.8 onde é comparado o comportamento entre  $p = 0.6(I_B)$  e  $p = 0.8(I_T)$ . Os valores de  $v_\infty$  voltam a ser estimados no intervalo  $I_R$ .

A partir da equação 2.39, estimamos o valor do  $\Gamma_\infty$  para cada probabilidade, com tempo máximo de deposição de  $2 \times 10^4$  monocamadas, mostrado pela figura 3.9. O gráfico interno ilustra a forma da curva para cada sistema. O exemplo utilizado foi para  $p = 0.6$  com  $L = 10^6$ .

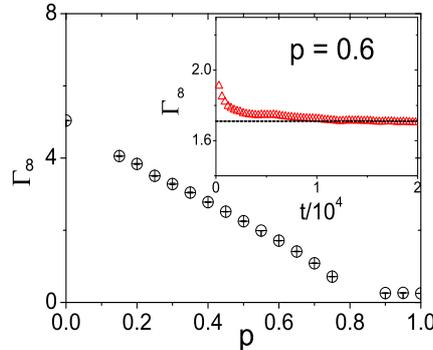


Figura 3.9: A dependência de  $\Gamma_\infty$  em função de  $p$ .

Após as estimativas de  $v_\infty$  e  $\Gamma_\infty$  para os intervalos  $I_B$  e  $I_R$ , analisamos as características da distribuição das alturas escaladas,  $q$ , associadas aos perfis irregulares, na região de crescimento ( $1 \ll t \ll L^z$ ).

Primeiro estimamos os valores dos cumulantes, necessários para calcular a skewness e a kurtosis. Fez-se a diferença entre os cumulantes das distribuições das alturas

escaladas simuladas e os cumulantes da distribuição TW para verificar o quão próximo são nossos resultados da solução da equação KPZ. Os gráficos da figura 3.10 mostram que a diferença é quase nula, para o segundo, terceiro e quarto cumulantes.

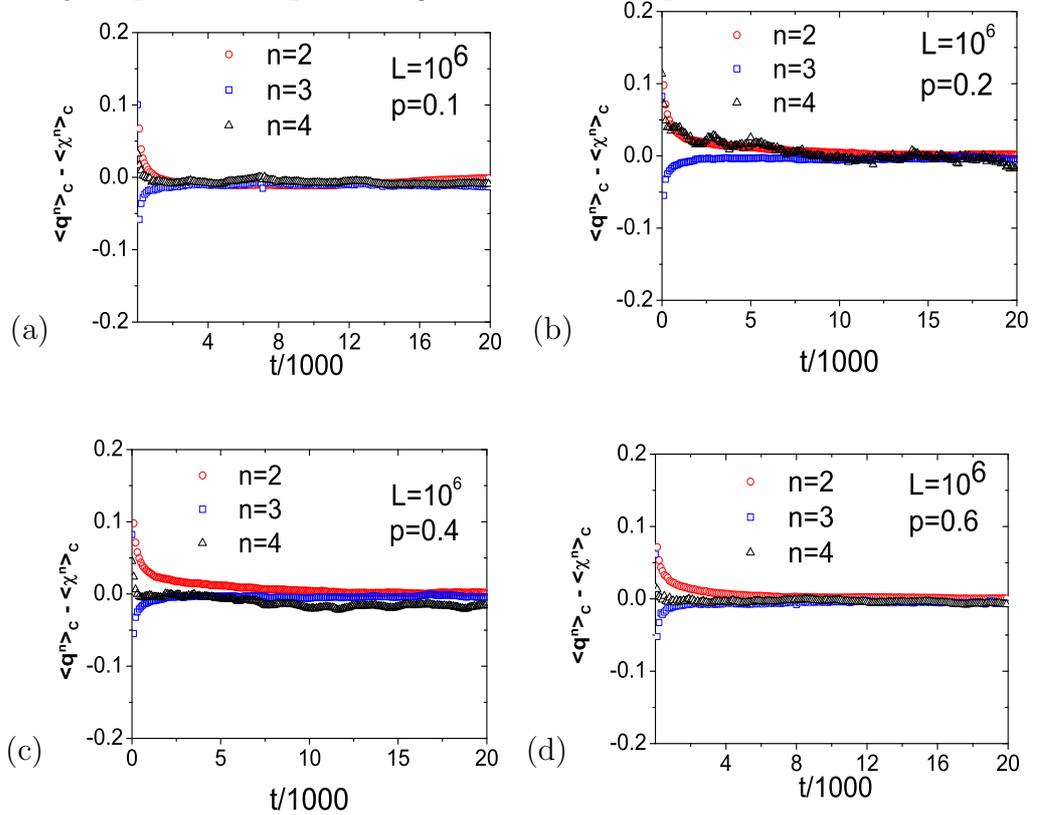


Figura 3.10: Diferença entre os cumulantes de  $\rho(q)$  e  $\rho(\chi_{TW})$  de perfis de comprimento  $L = 10^6$ , após 400 médias configuracionais, para probabilidades  $p = 0.1$ (a),  $0.2$ (b),  $0.4$ (c) e  $0.6$ (d).

Estimados os cumulantes, é possível encontrar a *skewness* ( $S$ ) e a *kurtosis* ( $K$ ) (ver figura 3.11) para distintos valores de  $p$ , os quais são diferentes de zero, indicando que as flutuações das alturas da interface não são gaussianas. Além disto,  $S$  e  $K$  têm valores muito próximo da *skewness* e *kurtosis* associadas à distribuição GOE TW ( $S_{TW} = 0.2935$  e  $K_{TW} = 0.1652$ ) [26].

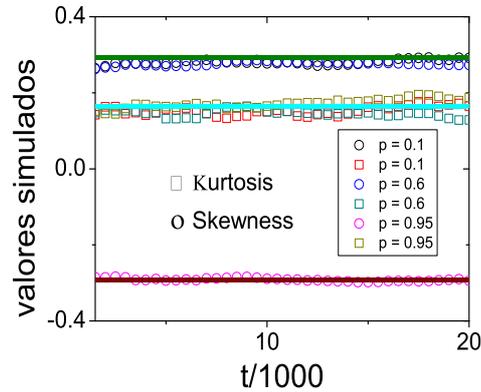


Figura 3.11: Evolução temporal da skewness e kurtosis para valores de  $p \in I_B$ , e  $p \in I_R$ . As linhas contínuas verde, vermelha e ciano representam os valores de  $S_{TW}$ ,  $-S_{TW}$  e  $K_{TW}$ , respectivamente.

Feita a análise de escala, observado o comportamento dos cumulantes, *skewness* e *kurtosis*, para  $p \in I_B$  e  $I_R$ , conclui-se que os modelos indicam fortemente pertencerem à classe de universalidade KPZ, para ambos os intervalos.

### 3.3 Distribuição de Alturas : Intervalo de Transição

Devido à mudança na dinâmica de crescimento dos perfis no intervalo  $I_T$ , causada pelo efeito de tempo finito para valores de  $p \neq 0.83$ , o mesmo será discutido separadamente dos outros intervalos. É interessante notar que o intervalo  $I_T$  não separa os intervalos  $I_B$  e  $I_R$  simetricamente, indicando que as características da DB prevalecem sobre o RSOS, numa maior faixa de probabilidade. A partir da análise da evolução temporal da *skewness* para distintas probabilidades do intervalo  $I_T$ , podemos dividi-lo em 2 subintervalos,  $I_{T,1}$  ( $p \in (0.75, 0.83)$ ) e  $I_{T,2}$  ( $p \in (0.83, 0.9)$ ). Observando o gráfico 3.12, verifica-se uma transição no valor positivo de  $S_{TW}$  para  $S = 0$ , no intervalo  $I_{T,1}$ . Já no intervalo  $I_{T,2}$ , a medida que  $p \rightarrow 0.9$  a *skewness* tende a  $-S_{TW}$ . Para as probabilidades mais próximas dos limites de  $I_T$ , a *skewness* tende rapidamente para o valor de  $S_{TW}$  e  $-S_{TW}$ , para  $p \in I_{T,1}$  e  $I_{T,2}$ , respectivamente. As demais probabilidades deste intervalo, com exceção de  $p = 0.83$ , o valor da *skewness* não chegou ao valor característico de  $S_{TW}$  devido ao efeito de tempo finito [52] pois, nossas simulações não excederam o tempo de deposição de  $2 \times 10^4$  monocamadas depositadas.

Para o tempo de deposição utilizado em nossas simulações, estimamos o valor

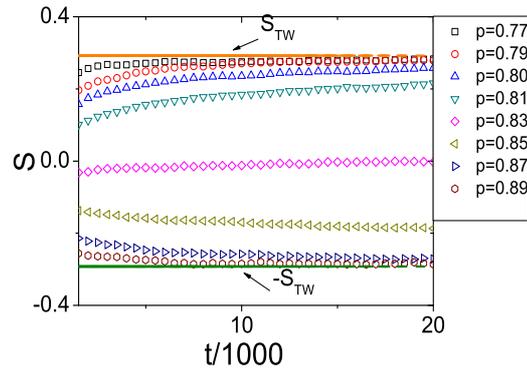


Figura 3.12: Evolução temporal da *skewness* para tempos de simulação  $t \leq 2 \cdot 10^4$  monocamadas. Os pontos são os dados simulados e as linhas contínuas representam os valores característicos da *skewness* GOE TW.

assintótico de  $S$  para as mesmas probabilidades utilizadas no gráfico da figura 3.12. A figura 3.13 apresenta os valores assintóticos estimados das *skewness*, para  $t = 2 \times 10^4$  monocamadas depositadas, em função da probabilidade.

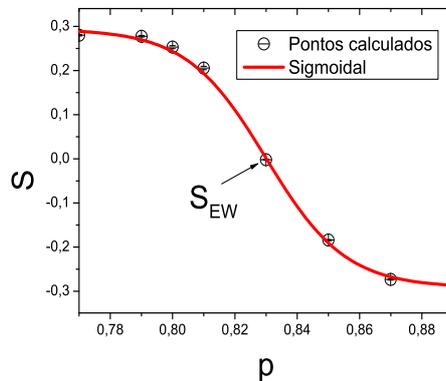


Figura 3.13: Dependência da *skewness* em função da probabilidade. Os pontos do gráfico são os valores assintóticos da *skewness* para  $t = 2 \times 10^4$  monocamadas. A linha contínua representa o ajuste sigmoideal.

Esta dependência foi ajustada por uma sigmoideal,

$$S(p) = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{1 + 10^{(\log(p_0) - \log(p))w}} \quad , \quad (3.1)$$

com uma excelente precisão, onde  $c_1 \approx 0.27, c_2 \approx -0.28$ , sendo o ponto de inflexão  $p_0 = 0.8293$  coincidente com o valor previsto anteriormente em nossa simulação ( $p \approx$

0.83), e  $w \approx 37.4 \times \ln(10)$ .

Quando observado o comportamento da *kurtosis*, através dos gráficos 3.14 e 3.15, verifica-se que, no início do intervalo de transição ( $p = 0.75$ ),  $K$  apresenta valores próximos de  $K_{KPZ}$ . Quando  $p = 0.83$  a *kurtosis* assume valor próximo de zero e no final do intervalo ( $p = 0.9$ ), volta a assumir valores em torno de  $K_{KPZ}$ . Esta mudança não brusca no valor da *kurtosis* também é em consequência ao efeito de tempo finito.

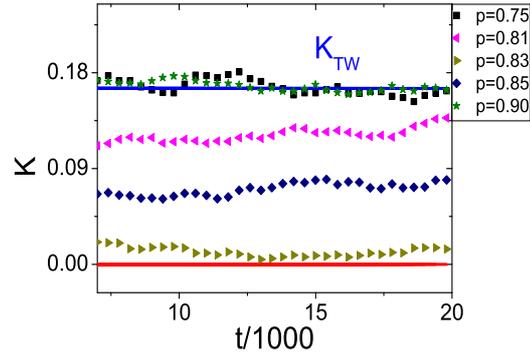


Figura 3.14: Evolução temporal da *kurtosis* para valores de  $p$  pertencentes a  $I_T$ .

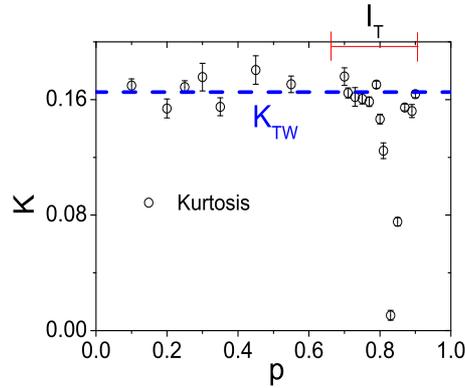


Figura 3.15: Kurtosis em função da probabilidade. Os pontos representam os valores simulado, juntamente com a barra de erro. A linha tracejada mostra o valor da *kurtosis* característica da distribuição GOW TW.

Para visualizar a diferença entre distribuições de *skewness* positiva, nula e negativa, construiu-se a função escalada  $\Omega\rho(\delta h/\Omega)$  como função de  $h \rightarrow (\delta h/\Omega)$  para 3 perfis crescidos com distintas probabilidades e se comparou com a distribuição TW,  $\rho(\chi)$  ( $S_{TW} > 0$ ) e  $\rho(-\chi)$  ( $S_{TW} < 0$ ), quando  $\chi \rightarrow -\chi$ . Utilizamos perfis crescidos com valores de  $p = 0.79, 0.83$  e  $0.87$ , ou seja, distribuições que possuem valores da *skewness*

positivo, nulo e negativo, respectivamente. Observando a figura 3.16, quando  $p = 0.79$ , os resultados simulados apresentam um pequeno desvio do lado esquerdo em relação à distribuição GOE TW, pois há uma contribuição maior para grandes valores de  $\delta h/\Omega$ , em contraste com a boa concordância do lado direito. Isso está de acordo com o fato da *skewness* ser positiva, mas possuindo um valor menor que  $S_{TW}$ . Para  $p = 0.83$ , a distribuição obtida através da simulação apresenta-se simétrica, concordando com a distribuição GOE TW de *skewness* nula. Finalmente para  $p = 0.87$ , a distribuição simulada é comparada com  $\rho(-\chi)$ , pois  $S$  é negativa. É possível identificar novamente uma boa concordância do lado direito da distribuição. No entanto, o afastamento do lado esquerdo entre a distribuição simulada e  $\rho(-\chi)$  é resultado de uma contribuição menor que o esperado para grandes valores de  $\delta h/\Omega$ , devido  $S$  não ser tão negativo quanto  $-S_{TW}$ .

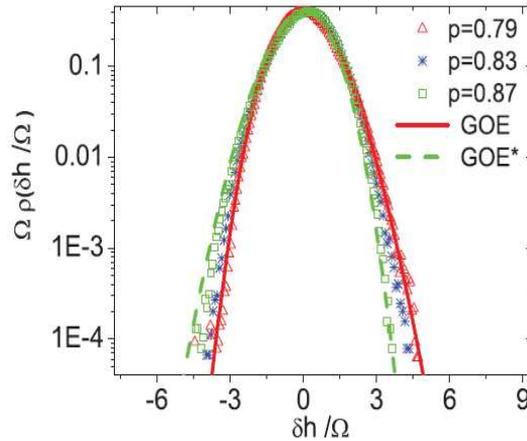


Figura 3.16: Os pontos representam a distribuição de alturas escaladas,  $(\delta h)/\Omega$ , para  $p = 0.79, 0.83, 0.87$ . As linhas contínuas e tracejadas (vermelha e verde), correspondem a  $\rho(\chi)$  com *skewness* positiva e negativa, respectivamente.

Após uma cuidadosa análise morfológica do intervalo de transição, os resultados indicam, através dos valores dos expoentes críticos juntamente com o comportamento de  $S$  e  $K$ , a quebra da classe de universalidade KPZ neste intervalo. Ao mesmo tempo em que, a classe de universalidade EW é observada em apenas um ponto do intervalo ( $p \approx 0.83$ ), onde é razoável supor que o fenômeno de crescimento é essencialmente linear.

### 3.4 Conclusões

Fizemos uma simulação de Monte Carlo para largas escalas espaciais de um modelo de crescimento competitivo composto por dois modelos, DB e RSOS, que são individualmente da classe de universalidade KPZ. Analisamos as propriedades de escala e distribuições de altura escalada para distintos valores de  $p$ . Nossos resultados mostram como  $v_\infty$  e  $\Gamma_\infty$  se comportam com a variação de  $p$ . Identificamos que estas quantidades e as propriedades de escala apresentaram comportamentos distintos para 3 intervalos, denominados de  $I_B$ ,  $I_T$  e  $I_R$ . No primeiro e último intervalos, os expoentes críticos apresentaram valores muito próximos aos valores dos expoentes de escala da equação KPZ e as quantidades estatísticas calculadas (*skewness*, *kurtosis*, cumulantes) são correspondentes à distribuição GOE TW. No intervalo de transição verificamos que, para  $p = 0.83$ , os expoentes críticos e as quantidades estatísticas possuíam valores característicos de modelos lineares. Tal resultado sugere, portanto, que há uma transição entre classes de universalidades KPZ-EW-KPZ. Neste intervalo, também verificamos uma mudança contínua nos valores de  $S$  e  $K$ , em consequência do efeito de tempo finito, pois nossas simulações não excederam o tempo de deposição  $t = 2 \times 10^4$  monocamadas. Estes resultados têm consequências diretas no âmbito experimental, uma vez que, controlando  $p$ , é possível obter características morfológicas distintas, bem como controlar o quão rugoso uma interface será.

Conhecer a morfologia destes perfis rugosos ajudará a compreender os fenômenos físicos que ocorrem quando os mesmos são utilizados. Uma delas é entender como a morfologia de equipotencias geradas numa região do espaço compreendida entre um perfil plano e outro rugoso, com potenciais fixos e distintos, variam para diferentes perfis rugosos utilizados. Esta discussão será feita no próximo capítulo.

## Capítulo 4

# Estudo do Potencial Elétrico em uma Região Confinada.

A próxima geração de emissores de elétrons, pela ação de um campo elétrico (*cold emission*), irá requerer um ajuste fino de vários parâmetros. Como exemplo pode-se citar a função trabalho, a morfologia da superfície do material e a temperatura. Uma vez que algumas aplicações requerem altas correntes elétricas em baixa tensão, as investigações da morfologia da superfície irregular são de grande importância prática [53]. Entender o comportamento do potencial elétrico próximo a superfícies condutoras pode ser uma primeira etapa deste processo de ajuste pois, na prática, o que se mede é o potencial elétrico e, a partir daí, estima-se o campo elétrico. Já é sabido que, para materiais sólidos, os efeitos de superfície são restritos a poucas camadas de átomos. No entanto, em problemas de campos e fluidos, esta influência pode ser determinante a uma maior distância da interface. Por exemplo, em problemas eletrostáticos, em que a presença de irregularidades na interface propaga irregularidades nas equipotenciais elétricas próximas [54]. A depender do sistema considerado, uma irregularidade do perfil afeta o movimento de partículas carregadas no campo elétrico da região. Podemos citar como exemplos o movimento de partículas responsáveis pela formação de imagens em 2 tipos de microscopias: microscopia iônica por campo e emissão por campo. Estes efeitos, resultantes de variações locais no campo, podem ser de interesse prático em outras áreas, por exemplo, para determinar propriedades

de dispositivos e emissores [55] e comportamentos de eletrodos [56, 57]. Portanto, a caracterização das equipotenciais é relevante não apenas para o meio em si, mas também para obter uma descrição detalhada da dinâmica de objetos em tais regiões.

Após a análise morfológica detalhada de interfaces irregulares, crescidas seguindo os modelos de DB e RSOS, apresentadas no capítulo 3 e que pode ser visto também no trabalho de Assis *et. al* [58] (Apêndice A), serão investigadas as propriedades morfológicas de uma família de linhas equipotenciais, confinadas numa região desprovida de fontes, entre uma interface plana e um perfil irregular. Na seção 4.1 apresentam-se os métodos utilizados para o cálculo das equipotenciais e, na seção seguinte, 4.2, discutem-se os resultados e as conclusões das análises feitas.

## 4.1 Equação de Laplace

Em uma região com campo eletrostático ( $\vec{\nabla} \times \vec{E} = 0$ ), o mesmo pode ser escrito como o gradiente de uma função escalar, denominada de potencial elétrico, de maneira que,

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi \quad . \quad (4.1)$$

Se, nesta mesma região do espaço, não há distribuição de cargas ( $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$ ), o potencial escalar satisfará a equação de Laplace,

$$\Delta \phi = 0 \quad . \quad (4.2)$$

O efeito de uma única protuberância em uma superfície lisa tem sido convenientemente modelado a partir de caminhos analíticos e numéricos. Porém, quando o perfil apresenta muitas irregularidades, o problema se torna mais difícil, sendo necessário recorrer a aproximações numéricas para resolver a equação de Laplace [61]. Para sistemas de alta simetria a equação de Laplace apresenta solução analítica. No entanto, para sistemas que têm uma região limitada por dois perfis com potenciais constantes mas distintos e condições de contorno periódicas<sup>1</sup> numa direção, usamos o

---

<sup>1</sup>Considera-se o último sítio do perfil correlacionado com o primeiro.

método de Liebmann. Este método consiste em substituir derivadas parciais por uma razão de diferenças.

Para a implementação do método é necessário que a região de integração seja discretizada em um conjunto finito de pontos, ou seja, um “grid”. Valores iniciais são atribuídos a estes pontos, obedecendo à condição de que estes valores estejam compreendidos entre os valores dos potenciais nos contornos da região. O potencial elétrico é então calculado em cada nodo. Isto é feito considerando o laplaciano, em coordenadas cartesianas,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad , \quad (4.3)$$

onde  $x$  e  $y$  representam os deslocamentos horizontal e vertical, respectivamente.

A determinação do potencial, ponto a ponto, é feita iterativamente utilizando um critério de convergência,

$$\|\phi^{(k)} - \phi^{(k-1)}\| \leq \varepsilon \quad , \quad (4.4)$$

sendo  $k$  o número de iterações. O cálculo é repetido até que  $\phi^{(k)}$ , em cada ponto da malha, possa ser considerado suficientemente próximo de  $\phi^{(k-1)}$ , determinado pela tolerância  $\varepsilon$ .

Então, seja  $h = \Delta x$  o espaçamento do “grid” na direção  $x$  e a função  $\phi(x)$  contínua até a quarta derivada, podemos expandir em série de Taylor,  $\phi(x+h)$  e  $\phi(x-h)$ , tal que,

$$\phi(x_n+h) = \phi(x_n) + \phi'(x_n).h + \frac{1}{2!}\phi''(x_n).h^2 + \frac{1}{3!}\phi'''(x_n).h^3 + \frac{1}{4!}\phi^{iv}(\xi_1).h^4 \quad , \quad x_n < \xi_1 < x_n+h \quad , \quad (4.5)$$

e,

$$\phi(x_n-h) = \phi(x_n) - \phi'(x_n).h + \frac{1}{2!}\phi''(x_n).h^2 - \frac{1}{3!}\phi'''(x_n).h^3 + \frac{1}{4!}\phi^{iv}(\xi_2).h^4 \quad , \quad x_n-h < \xi_2 < x_n \quad . \quad (4.6)$$

Somando 4.5 com 4.6, temos:

$$\frac{\phi(x_n + h) - 2\phi(x_n) + \phi(x_n - h))}{h^2} = \phi'' + \frac{\phi^{iv}(\xi)}{12} \quad , \quad x_n - h < \xi < x_n + h \quad . \quad (4.7)$$

Na notação a seguir, indicamos como índice de  $\phi$ ,  $n$  para se referir à posição do ponto no “grid”. O  $\pm$  indica que  $\phi$  é colocado em  $x$ , deslocado de  $\pm h$ . Portanto,

$$\frac{\phi_{n+1} - 2\phi_n + \phi_{n-1}}{h^2} \simeq \phi_n'' + O(h^2) \quad . \quad (4.8)$$

O termo  $O(h^2)$  significa que o erro é proporcional a  $h^2$ , quando  $h \rightarrow 0$ .

De modo similar, a primeira derivada pode ser aproximada como dependendo da diferença entre os valores das funções nos pontos sucessivos do “grid”, sendo assim,

$$\frac{\phi_{n+1} - \phi_{n-1}}{2h} = \phi_n' + O(h^2) \quad . \quad (4.9)$$

Com as aproximações 4.8 e 4.9, no ponto  $(x_i, y_i)$  o Laplaciano assume a forma:

$$\Delta\phi(x_i, y_i) \simeq \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} \quad . \quad (4.10)$$

Considerando um “grid” isotrópico,  $h = \Delta x = \Delta y = 1$  e como desejamos resolver a equação de Laplace,  $\Delta\phi(x_i, y_i) = 0$ , temos que,

$$\phi_{i,j} = \frac{1}{4} \phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} \quad . \quad (4.11)$$

A figura 4.1 ilustra a discretização da região de integração, região esta que associaremos a cada ponto espacial  $u$  um valor de potencial  $\phi$ .

Na equação 4.11 temos os valores do potencial em cinco pontos distintos: à direita, à esquerda, acima e abaixo de um ponto “central”  $\phi_{i,j}$  (Ver Figura 4.1). Para a determinação do potencial em todos os pontos, temos que distinguir pontos nos quais o valor do potencial varia ao longo das iterações e pontos para os quais o valor do potencial será mantido constante ao longo de todo o processo iterativo. Estes últimos correspondem aos pontos que definem a fronteira, portanto estamos utilizando uma

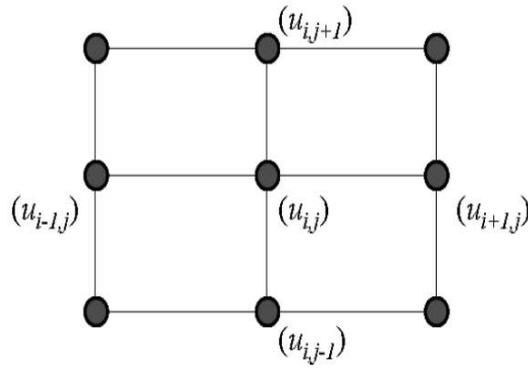


Figura 4.1: Região onde se deseja determinar o potencial elétrico, tratado como um conjunto discreto de pontos. A cada ponto espacial  $u_{i,j}$  é associado um potencial  $\phi_{i,j}$  [54].

condição de contorno tipo de Dirichlet. Na execução computacional associamos uma propriedade a cada ponto do domínio de integração, que pode ser chamada de função estado, atribuindo o valor 1 para pontos onde o potencial é mantido inalterado e 0 para pontos onde o potencial é sucessivamente recalculado pelo procedimento iterativo. Mantendo-se constante o potencial da fronteira, o processo de cálculo iterativo em cada ponto é realizado utilizando-se a equação 4.11, até que a diferença entre os potenciais calculados, num mesmo ponto e para todos os outros, em sucessivas iterações, se torne menor do que um valor adotado previamente, escolhido como critério de convergência, de acordo com a equação 4.4. Para nosso caso a região tem, como fronteira superior e inferior, duas superfícies mantidas a uma diferença de potencial constante e nas “laterais” da região de integração adotamos condições de contorno periódicas evitando portanto a atribuição de potenciais definidos. A seguir apresenta-se os resultados dos cálculos, utilizando este método para determinar os potenciais.

## 4.2 Discussão e Resultados

Trabalhos anteriores já analisaram morfologicamente as linhas equipotenciais geradas em uma região entre um condutor linear e rugoso, mantidos a um potencial constante e distintos [59, 60, 54]. No trabalho de Cajueiro *et. al* [59], o perfil utilizado foi um fractal auto-similar, a curva de Koch. Dias Filho *et. al* [60] consideram perfís

diferentes, resultado de crescimentos seguindo o modelo DB e o modelo de Family, além de um perfil tipo função de Weierstrass. Assis *et. al.*, em seu trabalho [54], discute os efeitos do tamanho dos perfis sobre a dimensão fractal das linhas equipotenciais compreendidas entre os dois perfis associados a potenciais fixos.

Neste trabalho vamos caracterizar morfologicamente, utilizando como quantidades a *skewness* e a *kurtosis* vistos na seção 2.3, as linhas equipotenciais geradas devido uma diferença de potencial fixa entre um condutor linear ( $\phi_l = 1000V$ ) e um rugoso ( $\phi_r = 0V$ ), sendo este último gerado a partir do modelo estudado no capítulo 3, para distintos valores de  $p$ , após  $2 \cdot 10^4$  monocamadas depositadas (figura 4.2).



Figura 4.2: Representação da região em que serão calculadas as linhas equipotenciais.  $\langle d \rangle$  representa a distância média entre os perfís e  $\langle h \rangle$  a altura média do perfil rugoso.

A partir da solução numérica da equação de Laplace, um conjunto de linhas equipotenciais, as quais são representadas por  $Y_{\phi_i}$  ( $\phi_i = 0.1, 1, 5, 15, 50, 100, 300, 500, 900$ ), foram determinadas por interpolação linear a partir dos valores dos potenciais do “grid”,  $\phi$ , como pode ser visto na figura 4.3.

Como foi visto no capítulo 3,  $p$  pode ser utilizado como um parâmetro de controle, no intuito de gerar interfaces mais ou menos intensamente rugosas. Esta variação da rugosidade se torna um problema quando comparamos mesmas equipotenciais geradas por diferentes perfis rugosos. Então, utilizamos como critério manter fixa a distância média entre os perfis,  $\langle d \rangle$ , para o cálculo das equipotenciais das distintas famílias.  $\langle d \rangle$  é encontrado tomando a diferença entre a altura do perfil plano e da altura média de cada perfil rugoso,  $\langle h \rangle$  (figura 4.2). O primeiro perfil rugoso utilizado, para atribuir um valor a  $\langle d \rangle$ , foi gerado para  $p = 0$  pois, com o aumento do valor de  $p$ ,

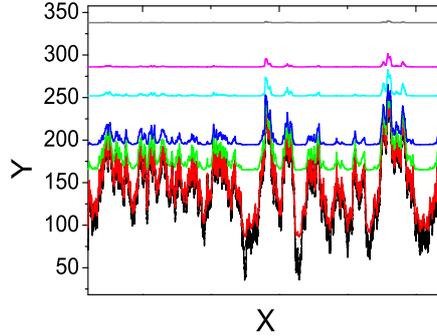


Figura 4.3: Linhas equipotenciais geradas em uma região entre o perfil plano e um rugoso. No gráfico acima encontram-se, de baixo para cima, as equipotenciais  $\phi_i = 0.1, 5, 50, 100, 300, 500, 900$ ). Grandezas com unidades arbitrárias de medida.

os perfis gerados são menos rugosos, garantindo portanto que os perfis planos e rugosos não se toquem. Mas esta diminuição da rugosidade não vale para todo o intervalo de  $p$ . Analisando a figura 4.4, como  $\langle d \rangle$  é mantido constante, é possível verificar que a rugosidade tem um mínimo para  $p \approx 0.83$ , voltando a crescer até  $p = 1$ .

Com o  $\langle d \rangle$  mantido constante, procede-se calculando a razão  $\langle d \rangle / \Omega$ , de maneira que obtemos um parâmetro que representa a quantidade de larguras de interfaces que distam os perfis, linear e rugoso, um do outro. Devido à variação da rugosidade entre os perfis, mesmas equipotenciais, geradas por diferentes perfis rugosos, ocupam diferentes regiões espaciais. Este parâmetro possibilita uma comparação entre as linhas equipotenciais, eliminando a influência da variação da rugosidade destes perfis irregulares.

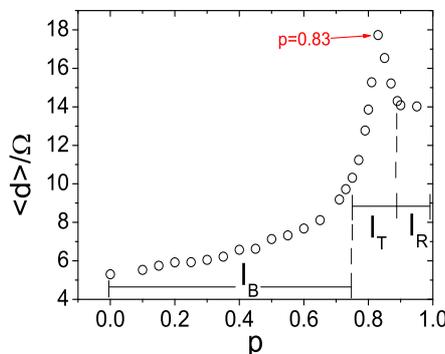


Figura 4.4: Gráfico de  $\langle d \rangle / \Omega$  em função da probabilidade. Cada ponto representa quantas larguras de interfaces de distância existem entre os perfis.

Analisando a figura 4.4, observamos um comportamento não trivial de  $\langle d \rangle / \Omega$

em função de  $p$ . Para  $p \in I_T$ , ocorre um crescimento mais acentuado de  $\langle d \rangle / \Omega$  até  $p = 0.83$ , seguido de uma queda também acentuada, em relação aos intervalos  $I_B$  e  $I_R$ . A partir daí, pudemos analisar as *skewness* e *kurtosis* de linhas equipotenciais, cada vez mais distantes dos perfis irregulares, geradas por distintos perfis.

Os valores das *skewness* e *kurtosis* foram transladados de 0.5 na vertical, para que todos os valores fossem positivos e assim possibilitasse uma análise em escala logarítmica. O resultado destas análises, para valores das *skewness* em função da equipotencial ( $\phi$ ), são mostrados nos gráficos da figura 4.5(a). Claramente é possível observar que a evolução espacial das *skewness* das famílias de equipotenciais, geradas com perfis rugosos crescidos com valores de  $p < 0.83$ , se comportaram de maneira similar. Um outro comportamento foi observado para valores de  $p = 0.83$  e  $p > 0.83$ . Os diferentes comportamentos das *skewness* em função das equipotenciais, coincidem com os intervalos em que a constante do termo não linear da equação KPZ ( $\lambda$ ) é positivo, nulo e negativo, respectivamente. Vale ressaltar que, quando foram realizadas as análises de propriedades de escala e das distribuição de alturas dos perfis, no intervalo de transição, os mesmos sofreram efeito de tempo finito, exceto para  $p \approx 0.83$  que é ponto crítico. No entanto, observando a figura 4.5(b), é possível verificar que este efeito sofrido pelos perfis não interfere na maneira com que as *skewness* das equipotenciais variam no espaço. Para valores de  $p$  próximos ao ponto crítico que possuem valores de  $\lambda$  positivo e negativo, as *skewness* variaram, em função do potencial, de maneira similar as *skewness* de famílias de equipotenciais calculadas a partir de perfis que possuem  $p \in I_B$  e  $I_R$ , respectivamente.

Quando verificamos os valores das *kurtosis* destas mesmas equipotenciais, percebemos também comportamentos distintos para os mesmos intervalos de  $p$  (figura 4.6).

Com a variação no valor  $p$ , uma série de parâmetros muda no crescimento das interfaces. A quantidade de poros no “bulk”, a rugosidade do perfil gerado, a velocidade de crescimento, são alguns exemplos. No entanto, os comportamentos das *skewness* e *kurtosis* das equipotenciais foram similares para intervalos de  $p$  bem definidos. Isto sugere que as equipotenciais geradas por perfis que são da mesma classe

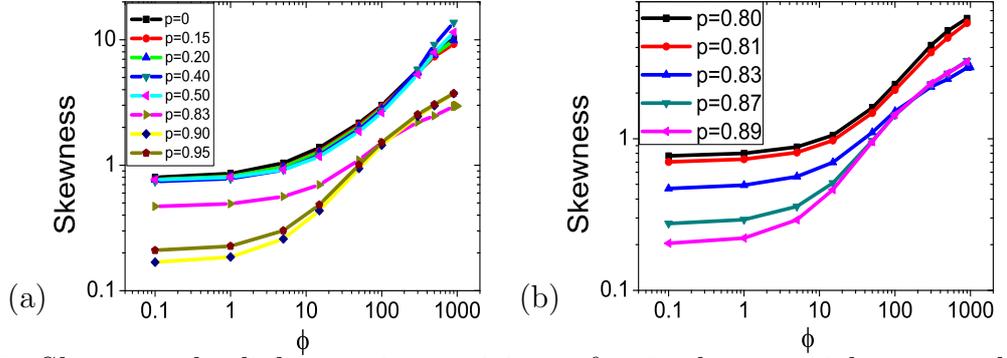


Figura 4.5: *Skewness* das linhas equipotenciais em função do potencial para o valor de (a)  $p \in I_B$  e  $I_R$ ; (b)  $p \in I_T$ .

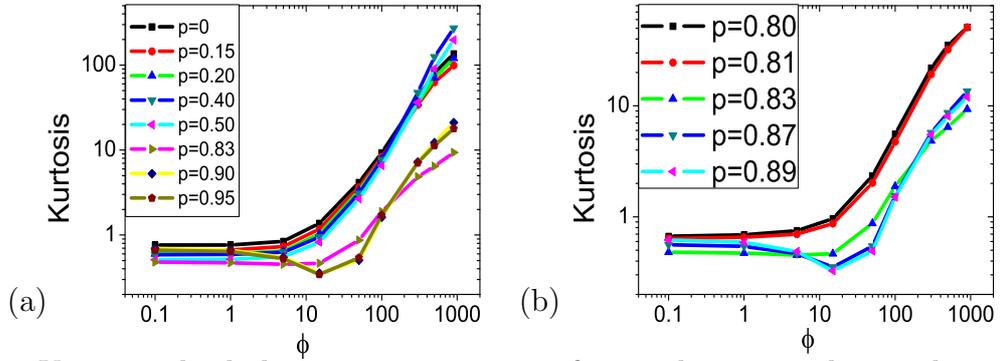


Figura 4.6: *Kurtosis* das linhas equipotenciais em função do potencial, considerando o valor de (a)  $p \in I_B$  e  $I_R$  (a); (b)  $p \in I_T$ .

de universalidade e com mesmo sinal de  $\lambda$ , variam espacialmente com características morfológicas similares.

No capítulo 3, os resultados indicam que quando  $p \approx 0.83$ , o expoente de crescimento dos perfís se aproxima dos valores característicos de modelos lineares (tabela 3.1), a *skewness* e *kurtosis* assumem valores próximos de zero (figuras 3.12 e 3.14) e, conseqüentemente, a distribuição das alturas apresenta-se simétrica (figura 3.16). Estudando as equipotenciais geradas por este perfil, os gráficos das figuras 4.5 e 4.6 mostram um comportamento distinto da *skewness* e *kurtosis* das equipotenciais, em comparação com os demais valores de  $p$ . Como os resultados obtidos da morfologia dos perfís crescidos para esta probabilidade indicam ser da classe de universalidade EW, comparamos as equipotenciais geradas por um perfil com  $p = 0.83$  com outro perfil que foi crescido seguindo o modelo de Family (modelo linear). O resultado

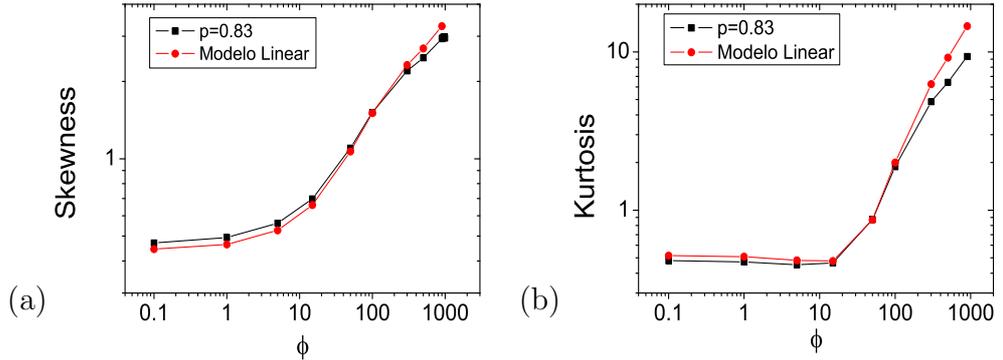


Figura 4.7: Comparação da (a) *skewness* e (b) *kurtosis* das equipotenciais geradas por um perfil crescido com  $p = 0.83$  e outro seguindo o modelo de Family.

desta comparação é apresentado pelos gráficos da figura 4.7. Os comportamentos da *skewness* e da *kurtosis*, de equipotenciais cada vez mais distantes do perfil irregular, em função do potencial, foi similar para ambos os perfís.

Este resultado é mais um indicativo de que este modelo competitivo RSOS+DB, estudado neste trabalho, se comporta, para  $p \approx 0.83$  e no limite hidrodinâmico, aproximadamente como um modelo linear, ou seja, é descrito aproximadamente pela equação EW.

Como visto no gráfico da figura 3.5, para probabilidades próximas a 0.83, a evolução temporal da rugosidade apresenta 2 regimes de crescimento, sendo um deles com inclinação de aproximadamente  $1/4$ . Sendo assim, fizemos outra comparação entre as *skewness* e *kurtosis* de distintas famílias de equipotenciais. Comparamos as famílias de equipotenciais calculadas para perfís crescidos com  $p = 0.83$ , outro seguindo o modelo de Family e um perfil com  $p = 0.80$ , crescido com tempo de deposição pertencente ao regime de crescimento da rugosidade com inclinação próxima a  $1/4$ . Os resultados apresentados nos gráficos da figura 4.8, mostram um comportamento completamente distinto para (a) *skewness* e (b) *kurtosis* das equipotenciais calculadas para o perfil com  $p = 0.80$ . Isto pode indicar que, o fato do sistema crescido com  $p = 0.80$  possuir um regime de crescimento da rugosidade com inclinação de valor próximo ao valor dos modelos lineares, não garante características morfológicas desta classe de universalidade.

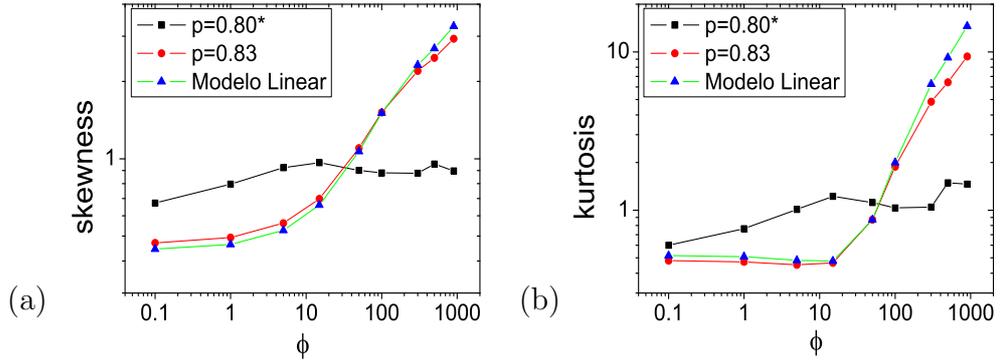


Figura 4.8: Comparação da (a) *skewness* e (b) *kurtosis* das equipotenciais geradas por um perfil crescido com  $p = 0.83$ , outro seguindo o modelo de Family e um perfil crescido com  $p = 0.80$ , para o tempo de deposição pertencente ao primeiro regime de crescimento com inclinação próxima a  $1/4$  (ver figura 3.5).

À medida em que as equipotenciais se afastam do perfil rugoso, as mesmas se tornam cada vez mais suaves e, desta forma, perdem informações a respeito da morfologia do perfil. Através da comparação entre as distâncias médias das equipotenciais e os perfís rugosos, pôde-se estimar a que distância do perfil rugoso as famílias de equipotenciais são distintas. A figura 4.9 apresenta esta análise. Os valores calculados foram acrescidos de 1 unidade para possibilitar uma análise em escala logarítmica. O acréscimo no valor de  $\langle d \rangle_{\phi_i}$  não influencia no tratamento dos dados, pois estamos interessados na maneira com que ocorre a variação das distâncias médias. É possível perceber que para famílias de equipotenciais com valores de  $p$  próximos, as distâncias médias das equipotenciais em relação ao perfil rugoso são distintas apenas para as equipotenciais próximas à interface. Já as famílias de equipotenciais com valores de  $p$  não tão próximos entre si, por exemplo  $p = 0.20$  e  $0.95$ , a diferença da distância média das equipotenciais são distintas para uma distância maior do perfil rugoso. Esta análise pode possibilitar encontrar a região do espaço na qual as equipotenciais difererem entre si, a ponto de conter informações da interface rugosa capazes de diferenciá-las das demais.

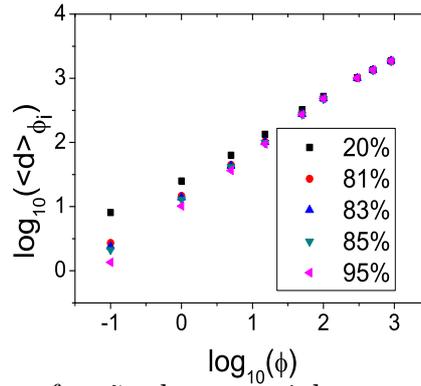


Figura 4.9: Gráfico de  $\langle d \rangle_{\phi_i}$  em função do potencial, em regiões entre um perfil liso e outro perfil rugoso crescido com  $p \in I_B, I_T$  e  $I_R$ . Valores de  $\langle d \rangle_{\phi_i}$  acrescidos de 1 unidade para possibilitar a análise em escala logarítmica.

Após toda esta análise da morfologia das equipotenciais geradas por perfis rugosos, crescidos por distintas regras locais de crescimento, os resultados indicam ser possível identificar se perfis distintos pertencem à mesma classe de universalidade, pois a evolução espacial da *skewness* e *kurtosis* das equipotenciais se dão de maneira similar, de acordo a classe de universalidade dos perfis utilizados. Pôde-se observar também qual região do espaço as famílias das equipotenciais diferem umas das outras, a depender do perfil rugoso utilizado, pois à medida em que se afasta do mesmo as famílias das equipotenciais assumem características morfológicas similares.

# Capítulo 5

## Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação estudou-se a distribuição de alturas de interfaces crescidas em  $1D+1$ , a partir de um modelo competitivo, DB e RSOS, controlado por um parâmetro  $p$ , que representa a probabilidade da partícula depositada seguir o modelo de deposição RSOS. Inicialmente foram analisadas as propriedades de escala dos perfis para  $p \in [0, 1]$ . Em seguida, buscou-se verificar se estes perfis eram auto-afins, seguindo a relação de escala de *Family – Vicsek*. Em relação aos expoentes críticos encontrados, os resultados indicaram que, para intervalos de  $p = [0, 0.75)$  ( $I_B$ ) e  $p = (0.9, 1]$  ( $I_R$ ), os expoentes de crescimento global possuíam valores característicos da classe de universalidade KPZ, corroborando com os resultados prévios [42]. No intervalo  $p \in (0.75, 0.9)$ , o qual foi chamado de intervalo de transição ( $I_T$ ), verificou-se que, para  $p = 0.83$ , o um valor do expoente de crescimento global se situa próximo ao valor do expoente de crescimento global característico de modelos lineares (classe EW). Para os demais valores de  $p$  deste intervalo, os expoentes de crescimento efetivos apresentaram valores intermediários aos valores dos modelos KPZ e EW, devido ao efeito do tempo finito. O expoente de rugosidade global também foi estimado, mas apenas para os intervalos  $I_B$  e  $I_R$ , os quais apresentaram valores próximos aos valores de modelos que são da classe de universalidade KPZ. No entanto, para o intervalo  $I_T$ , esta estimativa não foi realizada devido ao longo tempo computacional levado para a saturação da rugosidade para substratos de  $L = 10^6$ . Este comportamento é causado pelo *crossover* existente entre um regime de evolução temporal da rugosidade

com declividade de aproximadamente  $1/4$ , para um outro regime com declividade de aproximadamente  $1/3$ , para valores de  $p$  próximos a  $0.83$ . De posse dos expoentes, verificou-se que os perfis crescidos com  $p$  pertencentes a  $I_B$  e  $I_R$ , seguem a relação de escala de *Family – Vicsek*. Feita estas análises de escala, os resultados sugerem fortemente que, tal modelo, no limite hidrodinâmico, apresenta dinâmica de crescimento descrita pela equação KPZ.

Após o estudo da análise das propriedades de escala, investigou-se a distribuição das alturas escaladas para um tempo máximo de deposição de  $2 \times 10^4$  monocamadas depositadas. Os resultados obtidos mostram que  $v_\infty$  e  $\Gamma_\infty$  são dependentes de  $p$ , apresentando comportamentos distintos para cada intervalo. Para ambos os parâmetros verificou-se uma dependência aproximadamente linear com o parâmetro  $p$ , no intervalo  $I_B$ . Já no intervalo  $I_T$ , devido ao efeito de tempo finito, a dinâmica de crescimento dos perfis não é descrita pelo *ansatz* proveniente da solução da equação KPZ e, conseqüentemente, o mesmo não se aplica para o cálculo destas variáveis. No intervalo  $I_R$  os valores permaneceram quase constantes. Os cumulantes, *skewness* e *kurtosis*, das distribuições de alturas escaladas das nossas simulações, para os intervalos  $I_B$  e  $I_R$ , apresentaram valores característicos da distribuição GOE TW, com inversão de paridade da distribuição GOE para o intervalo  $I_R$ . Devido ao efeito de tempo finito, identificamos uma transição contínua KPZ-EW-KPZ nos valores da *skewness* e *kurtosis*, com  $p \approx 0.83$  sendo o ponto crítico.

A partir dos estudos realizados com tais perfis irregulares, os mesmos foram utilizados como fronteira de uma região desprovida de cargas e posto à um potencial fixo. Para a outra fronteira desta região foi utilizado um perfil plano de potencial fixo e distinto daquele do perfil irregular. Uma vez que não é possível resolver analiticamente a equação de Laplace, para este modelo, utilizamos o método de Liebmann para determinar o potencial ponto a ponto na região compreendida entre os perfis. Já as linhas equipotenciais foram determinados por interpolação linear. Com este arranjo, calculamos famílias de linhas equipotenciais utilizando distintos perfis rugosos, a fim de identificar as variações da morfologia de equipotenciais cada vez mais distantes do perfil irregular. Para isto, calculamos a *skewness* e a *kurtosis* das distintas famílias de

equipotenciais. Os resultados indicaram um comportamento não trivial destas quantidades, em função da distância média destes perfis equipotenciais ao perfil irregular. Para perfis pertencentes à classe de universalidade KPZ, o comportamento foi distinto em função do valor de  $\lambda$  ser positivo ou negativo. Para  $\lambda \approx 0$ , característica obtida para  $p \approx 0.83$ , um comportamento distinto dos previamente discutidos foi identificado. Com isto, comparamos os comportamentos entre famílias de equipotenciais geradas por um perfil crescido seguindo um modelo linear (modelo de Family) e outro perfil crescido com  $p = 0.83$ . Os resultados mostram um comportamento bastante similar das *skewness* e *kurtosis* em função do potencial. Comparou-se ainda estes comportamentos das *skewness* e *kurtosis* em função do potencial, de equipotenciais calculadas numa região do espaço, utilizando o perfil irregular que foi crescido com valor de  $p$  próximo ao ponto crítico e tempo de deposição pertencente ao regime de crescimento da rugosidade com declividade de aproximadamente  $1/4$ . Entretanto, mesmo com este regime de crescimento apresentando declividade próxima ao valor característico de modelos lineares, os resultados indicam que nesta região, as características morfológicas não são similares a sistemas pertencentes a esta classe de universalidade. Vale ressaltar que, ao estudar a morfologia dos perfis, devido ao efeito de tempo finito, o intervalo de probabilidade foi dividido em 3,  $I_B$ ,  $I_T$  e  $I_R$ . No entanto, os distintos comportamentos da *skewness* e *kurtosis* em função do potencial seguem os intervalos em que o valor de  $\lambda$  é positivo ( $p < 0.83$ ), nulo ( $p \approx 0.83$ ) e negativo ( $p > 0.83$ ). Esta análise indica que as equipotenciais de perfis crescidos com  $p \in I_T$ , com valores de  $\lambda$  positivos e negativos, têm comportamentos similares às equipotenciais de perfis que possuem  $p \in I_B$  e  $I_R$ , respectivamente. Sendo assim, os resultados sugerem que, mesmo para sistemas distintos, se estes pertencerem à mesma classe de universalidade, a morfologia das equipotenciais varia de maneira similar, apenas para sinais de  $\lambda$  iguais.

Quanto mais distantes do perfil irregular, menos informações as equipotenciais têm do mesmo. Com isto, fizemos um estudo relacionado as distâncias médias das equipotenciais em relação a seu respectivo perfil rugoso. Os resultados mostram que é possível identificar uma região no espaço em que as equipotenciais ainda refletem as

características do perfil irregular. Este estudo merece uma atenção, com perspectiva de aplicação futura, pois pode ajudar a encontrar uma melhor região do espaço para a microscopia de prova da superfície. Esta região pode ser distante o bastante para evitar ou desprezar interações de curto alcance, como a força de Van Der Waals, e próximas o bastante para diferenciar interfaces. A utilização da microscopia de força atômica (AFM) no modo não contato, têm ligação direta com este tipo de análise. Se a ponta, a qual analisa a morfologia, se aproximar muito da superfície, pode ocorrer uma possível interação de Van der Waals ou deformar a amostra analisada, bem como não deve ficar distante o bastante para não perder informações a respeito da morfologia da superfície.

# Referências Bibliográficas

- [1] F. D. A. A. Reis, Phys. Rev. E **73**, 021605 (2006).
- [2] A. L. Barabási, H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* ( Cambridge University Press, Cambridge, 1995 ).
- [3] J. Krug, Phys. Rev. Lett. **72**, 2907 (1994).
- [4] H. S. Greenside, chao-dyn/9612004 sunpublishedd; S. M. Zoldi and H. S. Greenside, Phys. Rev. Lett. **78**, 1687 (1997).
- [5] M. Castro *et al.*, Phys. Rev. E **57**, R2491 (1998).
- [6] A. Bru *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 4008 (1998).
- [7] J. Krug, Adv. Phys. **46**, 139 (1997).
- [8] J. J. Ramasco, J. M. López, M. A. Rodríguez, Phys. Rev. Lett. **84**, 10 (2000).
- [9] J. A. Bonachela, C. D. Nadell, J. B. Xavier, S. A. Levin, J. Stat. Phys. **144**, 303-315 (2011).
- [10] M. Matsushita, M. Sano, Y. Hayakawa, H. Honjo, Y. Sawada, Phys. Rev. Lett. **53**, 3 (1984).
- [11] D. E. Wolf, J. Villain, Europhys. Lett. **13**(5), 389-394 (1990).
- [12] S. Das Sarma, P. Tamborenea, Phys. Rev. Lett. **66**, 3 (1991).
- [13] S. F. Edwards, D. R. Wilkinson, Proc. R. Soc. Lond. A **381**, 17-31 (1982).
- [14] M. Kardar, G. Parisi, Y. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **56**, 9 (1986).

- [15] F. Family, *J. Phys. A: Math. Gen.* **19**, 441-446 (1986).
- [16] Vold, M. J. *J. Coll. Sci.* **14**, 168 (1959).
- [17] Vold, M. J. *J. Phys. Chem.* **63**, 1608 (1959).
- [18] B. Farnudi, D. D. Vvedensky, *Journal of Phys.: Conference Series* **286**, (2011).
- [19] J. M. Kim, J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 19 (1989).
- [20] J. M. Kim, *Jour. Korean Phys. Soci.* **45**, 6, 1413-1419 (2004).
- [21] J. M. Kim, M. A. Moore and A. J. Bray, Zero-temperature directed polymers in a random potential, *Phys. Rev. A* **44**, 23452351 (1991).
- [22] T. Halpin Healy, Directed polymers in random media: Probability distributions, *Phys. Rev. A* **44**, 34153418 (1991).
- [23] J. Krug, P. Meakin and T. Halpin Healy, Amplitude universality for driven interfaces and directed polymers in random media, *Phys. Rev. A* **45**, 638653 (1992).
- [24] K. Johansson, Shape fluctuations and random matrices, *Commun. Math. Phys.* **209**, 437476 (2000).
- [25] C. Tracy and H. Widom, Level-spacing distributions and the Airy kernel, *Commun. Math. Phys.* **159**, 151174 (1994).
- [26] M. Prähofer, H. Spohn, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 21 (2000).
- [27] J. Baik, P. A. Deift and K. Johansson, On the distribution of the length of the longest increasing subsequence of random permutations, *J. Amer. Math. Soc.* **12**, 11191178 (1999).
- [28] T. Sasamoto, Spatial correlations of the 1D KPZ surface on a at substrate *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 54956 (2005).
- [29] T. Sasamoto, Fluctuations of the one-dimensional asymmetric exclusion process using random matrix techniques *J. Stat. Mech.* P07007 (2007).

- [30] S. N. Majumdar, Les Houches **85**, 179 (2007).
- [31] K. A. Takeuchi and M. Sano, J. Stat. Phys. **147**, 853 (2012).
- [32] T. J. Oliveira, S. C. Ferreira, and S. G. Alves, Phys. Rev. E **85**, 010601 (2012).
- [33] J. Maunuksela, M. Myllys, O. P. Kähkönen, J. Timonen, N. Provatas, M. J. Alava and T. Alanissila, Kinetic roughening in slow combustion of paper, Phys. Rev. Lett. **79**, 15151518 (1997).
- [34] X. Wang, W. Zheng and L. Gao, The universality classes in growth of iron nitride thin films deposited by magnetron sputtering, Mater. Chem. Phys. **82**, 254257 (2003).
- [35] L. Miettinen, M. Myllys, J. Merikoski and J. Timonen, Experimental determination of KPZ height-fluctuation distributions, Eur. Phys. J. B **46**, 5560 (2005).
- [36] T. Sasamoto and H. Spohn, Phys. Rev. Lett. **104**, 230602 (2010).
- [37] K. A. Takeuchi, M. Sano, T. Sasamoto, H. Spohn, Sci. Rep. **1**, 34 (2011).
- [38] K. A. Takeuchi and M. Sano, Phys. Rev. Lett. **104**, 230601 (2010).
- [39] P. J. Yunker *et al.*, Phys. Rev. Lett. **110**, 035501 (2013).
- [40] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, Editora Universidade de São Paulo (2001).
- [41] T. J. da Silva, *Modelos de Crescimento de Interfaces Rugosas*. (Belo Horizonte : Brasil, 2001. Tese (Doutorado))
- [42] T. J. da Silva and J. G. Moreira, Phys. Rev. E **63**, 041601 (2001).
- [43] T. J. Oliveira and F. D. A. Aarao Reis, Phys. Rev. E **76**, 061601 (2007).
- [44] T. Halpin-Healy and Y. Zhang, Phys. Rep. **254**, 215 (1995).
- [45] F. D. A. Aarao Reis, Phys. Rev. E **63**, 056116 (2001).

- [46] J. G. Amar and F. Family, Phys. Rev. A **45**, R3373 (1992).
- [47] B. Grossmann, H. Guo, and M. Grant, Phys. Rev. A **43**, 1727 (1991).
- [48] T. Nattermann and L.-H. Tang, Phys. Rev. A **45**, 7156 (1992).
- [49] B. M. Forrest and R. Toral, J. Stat. Phys. **70**, 703 (1993).
- [50] T. J. Oliveira, K. Dechoum, J. A. Redniz e F. D. A. Aarão Reis, Phys. Rev. E **74**, 011604 (2006).
- [51] D. D. Vvedensky, Phys. Rev. E **67**, 025102 (2003).
- [52] T. J. Oliveira, Phys. Rev. E **87**, 034401 (2013).
- [53] G. N. Fursey, Appl. Surf. Sci., 215 113 (2003).
- [54] T. A. de Assis, F. B. Mota, J. G. V. Miranda, H. O. D. Filho, C. M. C. de Castilho, Jour. Phys.: Condens. Matter **18**, 3393 (2006).
- [55] Woodruff P. and Delchar T. A. 1994, *Modern Techniques of Surface Science*, 2nd edn (Cambridge: Cambridge University Press).
- [56] Filoche M. and Sapoval B. 2000, Electrochim. Acta **46**, 213.
- [57] de Levie R. 1965, Electrochim. Acta **10**, 113.
- [58] T. A. de Assis, C. P. de Castro, F. B. Mota, C. M. C. de Castilho e R. F. S. Andrade, Phys. Rev. E (86), 051607 (2012).
- [59] D. O. Cajueiro, V. A. de A. Sampaio, C. M. C. de Castilho e R. F. S. Andrade, J. Phys.: Condens. Matter **11** 4985 (1999).
- [60] H. de O. D. Filho, C. M. C. de Castilho, J. G. V. Miranda, R. F. S. Andrade, Physica A , 342, 388 (2004).
- [61] T. A. de Assis, *Campo e Potencial Elétrico numa Região do Espaço Confinada por uma Fronteira Fractal*. (Salvador:Brasil, 2007. Dissertação (Mestrado)).

# Apêndice A

## Trabalho publicado

Neste apêndice encontra-se o trabalho publicado como consequência dos resultados discutidos no capítulo 3 (referência [56] desta dissertação).

## Distribution of scaled height in one-dimensional competitive growth profiles

T. A. de Assis,<sup>1,\*</sup> C. P. de Castro,<sup>1</sup> F. de Brito Mota,<sup>1</sup> C. M. C. de Castilho,<sup>1,2</sup> and R. F. S. Andrade<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Campus Universitário da Federação, 40170-115 Salvador, BA, Brazil*

<sup>2</sup>*Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Energia e Ambiente (CIENAM)INCT-EA, Universidade Federal da Bahia, Campus Universitário da Federação, 40270-280 Salvador, BA, Brazil\**

(Received 12 June 2012; revised manuscript received 3 September 2012; published 15 November 2012)

This work investigates the scaled height distribution,  $\rho(q)$ , of irregular profiles that are grown based on two sets of local rules: those of the restricted solid on solid (RSOS) and ballistic deposition (BD) models. At each time step, these rules are respectively chosen with probability  $p$  and  $r = 1 - p$ . Large-scale Monte Carlo simulations indicate that the system behaves differently in three succeeding intervals of values of  $p$ :  $I_B \approx [0, 0.75]$ ,  $I_T \approx (0.75, 0.9)$ , and  $I_R \approx (0.9, 1.0]$ . In  $I_B$ , the ballistic character prevails: the growth velocity  $v_\infty$  decreases with  $p$  in a linear way, and similar behavior is found for  $\Gamma_\infty(p)$ , the amplitude of the  $t^{1/3}$ -fluctuations, which is measured from the second-order height cumulant. The distribution of scaled height fluctuations follows the Gaussian orthogonal ensemble (GOE) Tracy-Widom (TW) distribution with resolution roughly close to  $10^{-4}$ . The skewness and kurtosis of the computed distribution coincide with those for TW distribution. Similar results are observed in the interval  $I_R$ , with prevalent RSOS features. In this case, the skewness become negative. In the transition interval  $I_T$ , the system goes smoothly from one regime to the other: the height distribution becomes apparently Gaussian, which motivates us to identify this phenomenon as a transition from Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) behavior to Edwards-Wilkinson (EW) behavior back to KPZ behavior.

DOI: [10.1103/PhysRevE.86.051607](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.86.051607)

PACS number(s): 81.15.Aa, 73.90.+f, 05.45.Df, 61.43.Hv

### I. INTRODUCTION

In recent years there have been remarkable and successful efforts to control, measure, and understand the growth of disordered surfaces on 1D and 2D substrates using experimental, analytical, and numerical approaches [1–9]. In addition to being an intriguing scientific challenge, this problem has attracted considerable technological interest. Many properties of specifically devised materials depend on rough surfaces that are formed under nonequilibrium conditions.

From the theoretical point of view, the investigation of surface growth has been significantly dominated by successive analytical and numerical proposals for solving the Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) equation [10],

$$\partial_t h(x, t) = \mu_0 + \mu \Delta h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(x, t), \quad (1)$$

where  $\mu_0$  corresponds to a constant driving force and  $\eta(x, t)$  is white Gaussian noise. This equation contains a nonlinear term that, despite being simple, accounts for a considerable number of experimental results that cannot be described by the linear Edwards-Wilkinson (EW) equation [3, 11], which is recuperated by setting  $\lambda = 0$  in Eq. (1).

The first efforts toward solving the KPZ equation were based on a scaling theory that leads to the scaling exponents associated with the self-affine profiles. For correlated systems such as this one, the interface width ( $\Omega$ ) should follow the Family-Vicsek scaling assumptions [3]:

$$\Omega(L, t) \sim t^\beta g(Lt^{-1/z}), \quad (2)$$

where  $g$  is a scale function and  $\beta$  and  $z = \alpha/\beta$  correspond to the growth and dynamic exponents, respectively, while

$\alpha$  is the roughness exponent. Furthermore, for length scales  $L \ll \tilde{L} \sim t^{1/z}$ ,  $\Omega$  follows the power law  $\Omega(L) \sim L^\alpha$  and, for the case in which  $L \gg \tilde{L}$ ,  $\Omega(t) \sim t^\beta$ .

Research was subsequently directed toward evaluating the probability density functions (pdf) of the scaled height fluctuations. The seminal work in this direction was identifying that an exact pdf solution for the height distribution of the KPZ solution can be expressed in terms of Tracy-Widom (TW) distributions [4–6]. For different geometric conditions, they assume different forms that, in this case, obey the statistics of the Gaussian orthogonal ensemble (GOE) or the Gaussian unitary ensemble (GUE). Recent numerical results [8, 9] hint to the universality of the GOE and GUE distributions in discrete growth models on flat and circular one-dimensional substrates, respectively. This relationship supports the experimental results obtained for the growth of liquid crystals on substrates with initial flat or curved interfaces [6]. The numerical, experimental, and analytical results build strong evidences for a robust universality class of systems far from equilibrium based on evidences that go beyond the scaling law exponents.

The purpose of this work is to present new results for the stochastic growth of irregular 1D profiles considering two different sets of local rules, namely the ballistic deposition (BD) and the restricted solid-on-solid (RSOS) models. We identify the conditions where the scaled height fluctuation distribution of the competitive model belongs to some of the TW universality classes. We performed careful numerical simulations that allow, in addition to direct comparison with the TW distributions, the evaluation of the linear growth rate velocity ( $v_\infty$ ), the amplitude of the  $t^{1/3}$ -fluctuations ( $\Gamma_\infty$ ), and the skewness ( $S$ ) and the kurtosis ( $K$ ) of the resulting distributions. For most situations, the resulting profile fits well into the TW framework. However, we demonstrate that it is

\*thiagoaa@ufba.br

possible to fine-tune two individual processes that individually lead to TW distributions in such a way that any fingerprint of the two nonlinear growth models is removed. In this range, all the aforementioned measures become typical of the linear growth model, which motivates this phenomenon to be identified as a KPZ-EW-KPZ transition.

The remainder of this work is organized as follows: Sec. II introduces the competitive growth model based on two sets of deposition rules. The results are discussed in Sec. III, which is divided into three subsections: in the first one, we discuss the numerical procedures used to obtain reliable values of the growth exponents,  $\nu_\infty$  and  $\Gamma_\infty$ . Then, we present a detailed characterization of the height fluctuation distributions,  $\rho$ , in two intervals ( $I_B$  and  $I_R$ ), where the characteristic features are those of the BD and RSOS single models. Finally, the third subsection is devoted to the analysis of the transition interval,  $I_T$ , where the typical features of the linear models appear. Section IV closes the paper with our concluding remarks.

## II. COMPETITIVE GROWTH MODEL

There are many models that describe the growth processes of interfaces and surfaces, which are defined by local deposition rules. Such systems have different physical properties that are reflected in the scaling exponents, in the scaled height fluctuation distribution, etc. Nevertheless, models with quite distinct local rules may share intrinsic properties. This is the case, for instance, of the RSOS and BD models. Despite being quite different, theoretical considerations of the continuous limits of these models indicate that both of them are described by the same Eq. (1) [12], although their values of  $\lambda$  have opposite signs. For both systems, the reported values for the roughness and growth exponents agree with the values of  $\alpha_{\text{KPZ}} = 1/2$  and  $\beta_{\text{KPZ}} = 1/3$  [3].

Let us consider a competitive version of the RSOS and BD models mentioned above. We begin with a square lattice that has discrete values of  $x$ ,  $j \in [1, L]$  and  $h \geq 0$ . At the initial time  $t = 0$ , the lattice is empty. The profile is grown by vertically dropping mass elements over the different columns,  $j$ , such that, at each discrete value of the time  $t$ , the profile is described by the function  $h = h(j, t)$ , which identifies the largest value of  $h$  in column  $j$  that is occupied by a mass element. During each deposition event, a particle is released from a position,  $(j, h')$   $j \in [1, L], h' > h_{\text{max}}(t)$ , that is randomly chosen above the surface, and it falls vertically onto the growing substrate. Here,  $h_{\text{max}}(t)$  represents the largest value of  $h$  that is occupied by a mass element at time  $t$ . The falling particle will follow the RSOS deposition rule with probability  $p$ , and the BD rule with probability  $r = 1 - p$ . For the first case, the falling particle will adhere to site  $j$  if the condition  $|\Delta h(j, t)| = |h(j, t) - h(j \pm 1, t)| \leq M$  is satisfied, where  $M$  is the parameter that controls the roughness of the rough interface. Hereafter, we always consider  $M = 1$ .

In the BD case, the released particle falls vertically until it touches the surface and irreversibly adheres to the first site that has an occupied nearest neighbor. Therefore, this feature considers the possibility of lateral growth. The BD model generates a bulk material that has porosity and a positive

nonlinear parameter, because the growth velocity is greater than the deposition rate.

## III. RESULTS

### A. Scaling properties

We performed Monte Carlo simulations with  $L \in [10^2, 10^6]$  considering finite-size effects to define the onset of asymptotic scaling. Finite-size effects stay at the ground of numerical discrepancies that are often observed between the obtained values of the growth exponents and  $\alpha_{\text{KPZ}}$  or  $\beta_{\text{KPZ}}$ . Furthermore, there is an inherent difficulty in calculating  $\beta$ , which is related to the lack of a precise criterion to establish the limits of the growth region [where  $\Omega(t) \sim t^\beta$ ] for each system with size  $L$ . This question becomes of utmost importance for evaluating the height fluctuation distribution of finite systems because it is globally associated with a Gaussian function when  $t$  increases beyond the scaling region. Indeed, for  $t \gg L^z$ , it is hypothesized that the distribution of the height fluctuations becomes time independent and converges to a Gaussian curve  $\rho(\delta h) \propto \exp[-(\delta h)^2/\kappa L]$ , where  $\kappa$  is a nonuniversal constant [13] and  $\delta h = h - \langle h \rangle$ .

To clarify the limits of the growth region, we conducted a detailed analysis of the evaluation of  $\beta$ . Figure 1 presents a detailed study of the dependence of  $\beta$  on  $L$  in the case of  $p = 0$ . We can clearly observe differences between the value of  $\beta_L$  and  $\beta_{\text{KPZ}}$  as a consequence of finite-size effects. If we assume that  $\beta_L$  depends on  $L$  according to  $\beta_L = \beta_0(1 - L^{-\gamma})$ , our results lead to  $\beta_0 = 0.338 \pm 0.003$  and  $\gamma = 0.250 \pm 0.009$  when  $p = 0$  (BD), which is in excellent agreement with previous numerical results [14,15]. In the inset of the same figure, we indicate the growth region that was used to calculate  $\beta_L$ . To determine this region, we adopted the following procedure: (i) identify the interval in which the curve of  $\log_{10}[\Omega(t)] \times \log_{10}[t]$  is apparently linear; (ii) fit the points in this region with a high-degree polynomial function; (iii) identify the interval where the derivative of  $\log_{10}[\Omega(t)]$  as a function of  $\log_{10}[t]$  is nearly constant; and (iv) evaluate the value of  $\beta$  as the slope of the best linear fit in the identified interval.

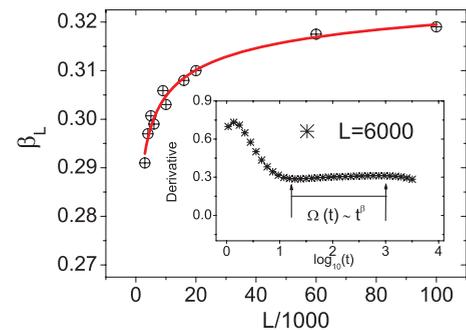


FIG. 1. (Color online) Dependence of  $\beta_L$  on  $L$  for  $p = 0$ . Finite size effects cause a discrepancy between  $\beta_L$  and  $\beta_{\text{KPZ}}$ . The solid red line indicates the ansatz function  $\beta_L = \beta_0(1 - L^{-\gamma})$ , with best fitting values  $\beta_0 = 0.338 \pm 0.003$  and  $\gamma = 0.250 \pm 0.009$ . The inset shows the derivative of the polynomial function that best fits the numerical values of  $\log_{10}[\Omega(t)]$  as a function of  $\log_{10}[t]$  for  $L = 6000$ . It is used to estimate the growth interval  $[\Omega(t) \sim t^\beta]$  for the calculation of  $\beta_L$ .

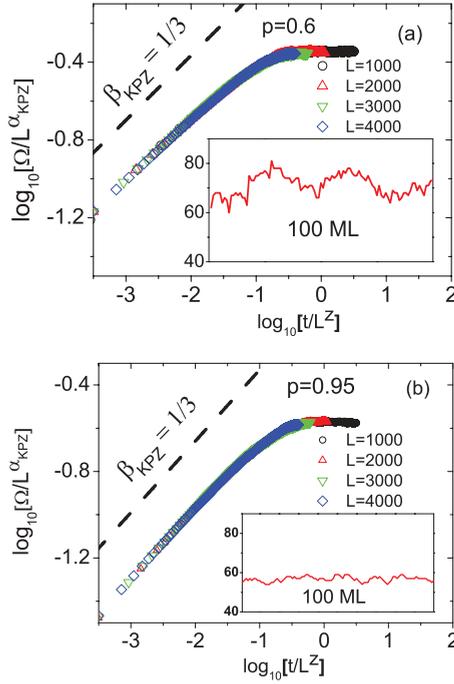


FIG. 2. (Color online) Dependence of the interface width  $\Omega$  with respect to  $t$  using Family-Vicsek scaled variables.  $1 + 1$  dimensional KPZ values of  $\alpha$  and  $z$  are used for the RSOS + BD competitive model: (a)  $p = 0.6$ ; (b)  $p = 0.95$ . The dashed lines indicate the KPZ growth exponent  $\beta_{\text{KPZ}} = 1/3$ . In the corresponding insets, the solid red (gray) line indicates the profile after deposition of 100 monolayers.

Before discussing the height fluctuations, it is important to recall that, for a profile  $h(j, t)$  growing on a finite substrate, the long time limit,  $1 \ll t \ll L^z$  [16], obeys the equation

$$h(j, t) = t \left[ v_\infty \pm \left( \frac{\Gamma_\infty}{t^2} \right)^{1/3} q \right], \quad (3)$$

where  $v_\infty$  represents the interface growth velocity and  $\Gamma_\infty$  is related to the parameter  $\lambda$  and depends on the growth model.  $q$  represents a time-independent random variable used for the purpose of comparing our numerical estimates with the analytical solution for the KPZ equation. The analytical solution for the KPZ equation is such that the distribution  $\rho(q)$  is a pertinent TW distribution. Therefore, the comparison of our results with those for the KPZ equation is conducted by comparing the distribution  $\rho(q)$  resulting from the numerical simulations with the GOE distribution,  $\rho_{\text{TW}}(q) = \rho(\chi)$ .

In Fig. 2, we present numerical results for  $\Omega(t)$  as a function of  $t$  for  $p = 0.6$  and  $p = 0.95$ . In both panels, it is possible to realize that, by considering Eq. (2) together with the values of  $\beta_{\text{KPZ}}$  and  $\alpha_{\text{KPZ}}$ , we obtain a data collapse for the results with different values of  $L$ . This collapse is verified for both the growth region and for the flat part of the curve that represents the correlated growth. The typical features of the curves shown in Fig. 1 for  $p = 0$  are also reproduced when we consider the values of  $p$  used in Fig. 2. This result reflects the fact that the competitive growth model presents the self-affinity described by the KPZ critical exponents for large intervals of  $p$ . The validity of this result, which was rigorously obtained in the hydrodynamic limit for both the pure BD ( $p = 0$ ) and RSOS

( $p = 1$ ) models, is preserved when the two processes are competitive in the intervals  $I_B \approx [0, 0.75]$  and  $I_R \approx [0.9, 1]$ . In the transition interval  $I_T \approx (0.75, 0.90)$ ,  $\beta$  deviates from  $\beta_{\text{KPZ}}$ . A previous study of competitive growth models involving the BD and RSOS rules [17] reported the value of  $\beta \approx 0.27$  when  $p \sim 0.83$ , which remains close to that of the linear model ( $\beta_{\text{EW}} = 1/4$ ) [3, 11]. Our simulations indicate that the  $p = 0.83$  competitive model becomes even closer to the EW model. When  $L = 10^5$ , the procedure illustrated in Fig. 1 leads to  $\beta \approx 0.265$ .

## B. Height distribution: Nonlinear regime

Let us present results that, together with height distribution fluctuations in the growth region, go beyond the exponent evaluation and allow for a detailed characterization of the three intervals:  $I_B$ ,  $I_T$ , and  $I_R$ . We first estimate the parameter  $v_\infty$ , which is related to  $\lambda$  in Eq. (1). For a rough interface whose dynamics are governed by the KPZ equation, the average velocity in a given scale  $\ell$ , not considering the drift velocity due to external forces, is given by  $v = \lambda/\ell \int_0^\ell dx \sqrt{1 + (\nabla h)^2}$ . Assuming  $(\nabla h)^2 \ll 1$ ,  $v \approx \lambda + \lambda/2\ell \int_0^\ell dx (\nabla h)^2$ . If there is an average slope  $m = \langle \nabla h \rangle$  within an interval of length  $\ell$  of the interface, the result indicates that the velocity of the interface within that interval is approximately given by:  $v(m) \approx \lambda + (\lambda/2)m^2$ . Thus,  $v(m)$  is the slope-dependent velocity that should be observed in the coarse-grained scale  $\ell$ . Then,  $\lambda = v(m = 0) = v_\infty$  [18, 19].

In the insets of Fig. 2, the morphology of the resulting exposed interface (red line) after the deposition of 100 monolayers is shown. These results clearly indicate that  $v_\infty$ , which was determined by the rate of temporal variation of the mean height of the interface  $\langle h \rangle$ , is a function of  $p$ . According to Eq. (3), we obtain that  $d\langle h \rangle/dt \approx v_\infty + ct^{-2/3}$ , where  $c$  is a constant [18]. In Fig. 3(a), we show the dependence of the growth velocity  $v_\infty$  as a function of the parameter  $p$ . The values for the limit situations,  $p = 0$  and  $p = 1$ , are in good agreement with quite recent results [9]. Our results indicate that the interface growth velocity monotonically decreases with  $p$ , and we can clearly identify different decreasing regimes. The first one is characterized by a linear behavior when  $p \in [0, 0.75]$ . For  $p \in I_T$ , the behavior of  $v_\infty$  is more complex. In fact, the KPZ scaling assumption [Eq. (3)] breaks down. This result is illustrated in the inset of Fig. 3(a). In this inset, we can follow the procedure for estimating the velocity when considering  $p = 0.6$ . For  $p = 0.8$ , the linear dependence between  $d\langle h \rangle/dt$  and  $t^{-2/3}$  [Eq. (3)] is not valid. This is the reason why the estimation of  $v_\infty(p = 0.8)$ , which roughly corresponds to the center of  $I_T$ , is subject to large fluctuations. Finally, the values of  $v_\infty$  can be computed again for  $p = 0.9$  and  $1.0$ . The decreasing straight line linking these two points is considerably less tilted than the one that approximates the discrete points in the interval  $[0, 0.75]$ .

We also evaluate the amplitude of the  $t^{1/3}$  fluctuations from the second-order height cumulant  $\Omega^2(t) \simeq (\Gamma t)^{2/3} \langle \chi^2 \rangle_c$ . For large values of time, this quantity provides information about the most likely value and confidence interval for estimating the parameter  $\Gamma_\infty$ , which depends on how  $\langle \chi^2 \rangle_c$  is normalized. We consider  $\langle \chi^2 \rangle_c$  as the variance of  $\rho(\chi)$  ( $\sim 0.63805$ ) [9, 20]. Figure 3(b) demonstrates how the parameter  $\Gamma_\infty$  varies with

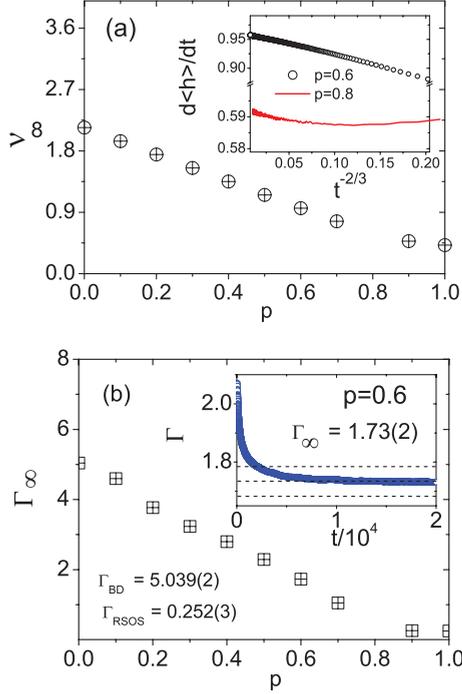


FIG. 3. (Color online) (a) The interface growth velocity  $v_\infty(p)$  as a function of  $p$  for the competitive RSOS + BD model. In the limit situations,  $v_\infty(p=0) = 2.142(7)$  and  $v_\infty(p=1) = 0.4191(4)$ . In the inset, the procedure for estimating the velocity  $d\langle h \rangle/dt$  for  $p=0.6$ . For  $p=0.8$  [solid red (gray) line], Eq. (3) is not valid. (b) The dependence of the parameter  $\Gamma_\infty$  with respect to  $p$ , with a change in the derivative  $d\Gamma/dp$  in the interval  $I_T$ . In the inset, the  $\Gamma_\infty$  estimation procedure for  $p=0.6$  is presented.

the probability  $p$ . We can then observe a similar transition behavior as that observed for  $v_\infty$  when  $p \in I_T$ , an evidence of an abrupt change in the growth dynamics. In the corresponding inset, we illustrate the procedure adopted for estimating  $\Gamma_\infty$  for  $p=0.6$ .

Now we analyze several features of the height distributions that are associated with irregular profiles. With the  $n$ th order cumulants ( $n=2, 3$ , and 4) of the local height,  $\langle h^n \rangle_c$ , we determine  $S = \langle h^3 \rangle_c / (\langle h^2 \rangle_c^{3/2})$  and  $K = \langle h^4 \rangle_c / (\langle h^2 \rangle_c^2)$  [18]. We clearly observe in Fig. 4(a) that, in the growth region, both quantities are nonzero, which suggests that the interface fluctuations are not Gaussian. Furthermore,  $S$  agree particularly well with those associated to  $\rho(\chi)$  ( $S_{TW} = 0.2935$ ) [20], except in the case where  $p=0.8$ . With the exception of this value of  $p$ , the values of  $v_\infty(p)$  and  $\Gamma_\infty(p)$  allow for the calculation of  $\rho(q)$ , which is the distribution of scaled height fluctuations, where  $q \equiv [h - v_\infty(p)t] / [\Gamma_\infty(p)t]^{\beta_{KPZ}}$ . In this procedure, we consider the growth interval for each system according to the conditions  $1 \ll t \ll L^2$ .

Figure 4(b) illustrates the behavior of the height fluctuation distribution. For three distinct values of  $p$  within the intervals  $I_B$  and  $I_R$ , the resulting pdf converges to the GOE distribution (left side). This result is consistent with theoretical results for the KPZ equation and supports our claims that, in these two intervals, the competitive model also falls into the same universality class. In the inset of this figure, we present the  $n$ th order cumulants ( $\langle q^n \rangle_c$ ) for the scaled height obtained from our

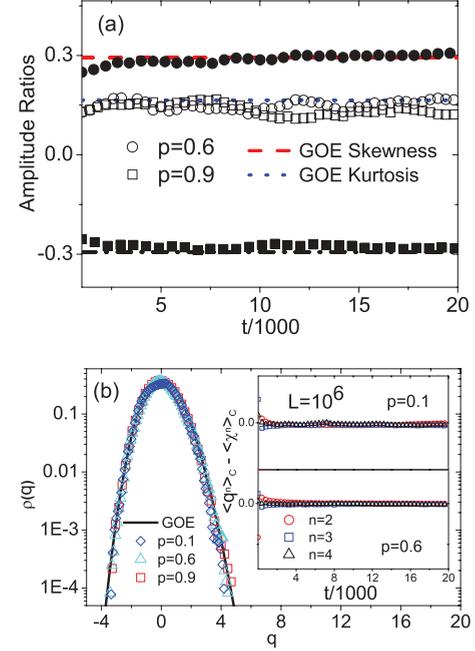


FIG. 4. (Color online) (a) Amplitude ratios (Skewness and kurtosis) of the measured height distribution as a function of time for  $p=0.6$  and  $p=0.9$ . The skewness and the kurtosis for  $\rho(\chi)$ , respectively,  $S_{TW} = 0.2935$  and  $K_{TW} = 0.1652$ , are indicated by the dashed and dotted lines [20]. (b) Distribution of scaled height fluctuation for  $p=0.1, 0.6$ , and  $0.9$ . The numerical results are compared with GOE distribution, indicated by the solid black line. In the inset, the differences between the cumulants resulting from the simulations  $\langle q^n \rangle_c$  and the corresponding GOE TW values  $\langle \chi^n \rangle_c$ , for  $p=0.1$  and  $p=0.6$ .

simulations together with those for the GOE TW distributions  $\langle \chi^n \rangle_c$ . A rapid convergence is observed for  $p=0.1$  and  $p=0.6$ .

### C. Height distribution: Transition interval

Let us discuss the results of  $p$  in the interval  $I_T$ . Note that  $I_T$  is not symmetrically placed within the  $[0,1]$  interval, which indicates that the BD character prevails for a larger range of  $p$  values than that of the RSOS.  $I_T$  can be divided into two subintervals,  $I_{T,1}$  and  $I_{T,2}$ ; in the first one, the system undergoes a KPZ-EW transition, which is reversed in  $I_{T,2}$ .

First, consider the dependence of  $S$  with  $p$ . In Fig. 5(a), we observe that when  $p \in I_{T,1} \approx (0.75, 0.83)$ ,  $S$  is positive but decreases monotonically, departing from  $S_{TW}$ , until  $p \sim 0.83$ , when it becomes  $\approx 0$ . Similar behavior is observed for the kurtosis (not shown); it departs from  $K_{TW}$  at  $p \sim 0.75$ , decreases monotonically, and becomes  $\approx 0$  at  $p \sim 0.83$ . For  $p \in I_{T,2} \approx (0.83, 0.90)$ ,  $S$  becomes negative, approaching the limit  $-S_{TW}$  as  $p \rightarrow 0.9$ , whereas  $K \rightarrow K_{TW}$  in this same limit. This result enables a break of the KPZ universality class to be identified in the whole interval  $I_T$ . Simultaneously, the EW universality class is only observed for a single point in the interval, where it is reasonable to suppose that the growth phenomenon is essentially linear.

In Fig. 5(b), we show how the asymptotic value of  $S$  changes with  $p$ . Such dependence can be well represented by sigmoidal

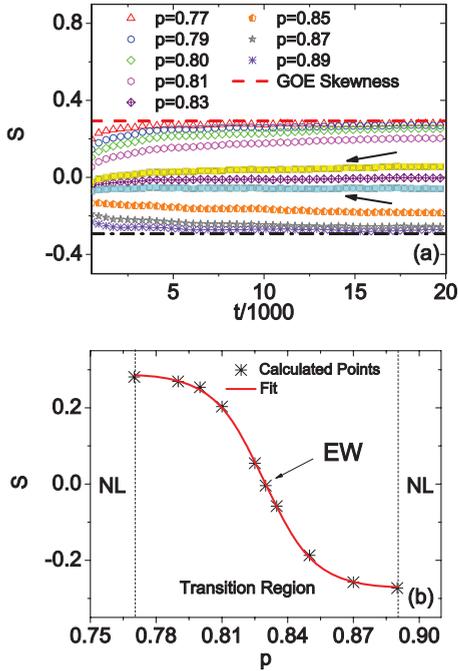


FIG. 5. (Color online) (a) Skewness as a function of the time computed for different probabilities  $p \in I_T$ . The dashed line correspond to the GOE skewness. The arrows highlight the skewness para  $p = 0.83 \pm \epsilon$  com  $\epsilon = 0.005$ . (b) Skewness as a function of  $p$ . The solid line corresponds to sigmoid function [Eq. (4)], with the inflexion point at  $p \approx 0.83$  where the skewness is close to zero. The arrow locates the system with EW-like features. NL indicates the nonlinear regime.

curve

$$S(p) = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{1 + \exp[w(p - p_0)]} \quad (4)$$

(obtained  $R^2 = 0.999$ ), where  $c_1 \approx 0.27$ ,  $c_2 \approx -0.28$ , the inflexion point  $p_0 = 0.8293$  coincides with the value previously identified by the simulation ( $p \approx 0.83$ ), and  $w \approx 37.4 \times \ln(10)$ .

To provide a complete picture of the resulting distributions in  $I_T$ , we illustrate in Fig. 6 the depart from the produced distribution with respect to the GOE TW curve for some

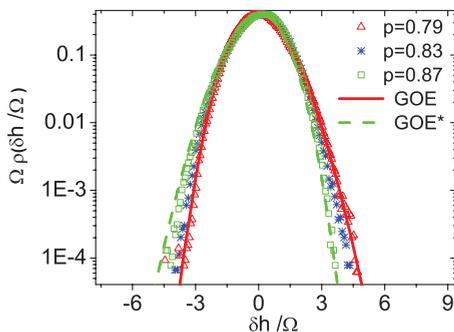


FIG. 6. (Color online) Scaled height  $(\delta h)/\Omega$  distributions for  $p = 0.79, 0.83$ , and  $0.87$ . The solid and dashed lines correspond to  $\rho(\chi)$  with positive and negative skewness, respectively.

values of  $p$  in this interval. In this figure, we use the scaled  $\Omega\rho(\delta h/\Omega)$  function as a function of  $h \rightarrow (\delta h)/\Omega$  when  $p = 0.79, 0.83$ , and  $0.87$ . In addition, for the purpose of providing a better comparison of the points when  $p \in I_T$ , we also draw the inverted TW distribution  $\rho(-\chi)$ . When  $p = 0.79$ , the simulation results show a slight deviation from  $\rho(\chi)$  in the left tail, with larger than expected contributions at larger values of  $\delta h/\Omega$ , in contrast with a very good agreement in the right-hand side. This result is in agreement with a positive  $S$ , albeit smaller than  $S_{TW}$ . For  $p = 0.83$ , the simulation distribution becomes fairly symmetric, with clear deviations of the asymptotic behavior on both sides of  $\rho(\chi)$ . Finally, for  $p = 0.87$ , the distribution should be compared with  $\rho(-\chi)$  with a negative  $S$ . We again identify a fairly good agreement in the right tail. Nevertheless, the deviations from  $\rho(\chi)$  in the left-hand side results from smaller than expected contributions at larger values of  $\delta h/\Omega$ . This result explains why  $S$  is less negative than  $-S_{TW}$ .

#### IV. CONCLUSIONS

In this work, we conducted large-scale Monte Carlo simulations of a competitive growth model based on two different sets of local rules, which individually lead to the same KPZ universality class. The high quality of our results, together with a careful analysis of the scaling regions, permitted essential features of the scaled height distributions to be determined. Our results provide a detailed characterization of the dependence of the average growth rate  $v_\infty$ , the fluctuation magnitude  $\Gamma_\infty$ , and the height scaled distribution as a function of  $p$ . All of these parameters present distinct behaviors in three ranges of  $p$  values, which we identified as  $I_B$ ,  $I_T$ , and  $I_R$ . The first and the third ones are well described by GOE  $\rho(\chi)$ , albeit with inverted parity. The detailed investigation of the scaled height distribution in the transition interval  $I_T$  identified how its form changes continuously, which produces changes in the values of  $S$  and  $K$ . In particular, we described two mechanisms that account for the deviation of the produced distribution with respect to GOE  $\rho(\chi)$  when  $p$  has just entered and is about to leave  $I_T$ .

These results have interesting consequences in constructing experimental devices, because a choice of  $p$  can allow us to control irregularities (departs from TW distribution) that can move the TW limits  $\chi \rightarrow \pm\infty$ . Then, by exerting an adequate control in the surface growth process (for example, by direct interference) such that the resulting geometry adequately deviates from the TW distribution in the right asymptotic limit, it is possible to optimize the final produced electronic current density. This fact is being systematically investigated in our group with the purpose of simulating field emitter devices with irregular surfaces. Such deviations from the asymptotic limits of TW distributions may even appear in the promising field of emitter materials (conducting polymers) that are grown on 2D substrates.

In conclusion, the results of this study provide the possibility to analyze the height distributions of a more realistic growth composed of competitive models that establish the limits where the TW distributions can also be observed.

## ACKNOWLEDGMENTS

This work has been supported by CNPq (Brazil) by means of researcher grants and through the INCT-SC project,

FAPESB (Brazil) under PRONEX 0006/2009 project, and CAPES (Brazil). T.A.d.A. acknowledges Herbert Spohn for providing the Tracy-Widom distributions data.

- 
- [1] P. Meakin, *Phys. Rep.* **235**, 189 (1993).
  - [2] J. C. Russ, *Fractal Surfaces* (Plenum, New York, 1994).
  - [3] A. L. Barabasi and H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
  - [4] T. Sasamoto and H. Spohn, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 230602 (2010).
  - [5] K. A. Takeuchi and M. Sano, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 230601 (2010).
  - [6] K. A. Takeuchi, M. Sano, T. Sasamoto, and H. Spohn, *Sci. Rep.* **1**, 34 (2011).
  - [7] T. Sasamoto and H. Spohn, *J. Stat. Mech.* (2010) P11013.
  - [8] S. G. Alves, T. J. Oliveira, and S. C. Ferreira, *Europhys. Lett.* **96**, 48003 (2011).
  - [9] T. J. Oliveira, S. C. Ferreira, and S. G. Alves, *Phys. Rev. E* **85**, 010601 (2012).
  - [10] M. Kardar, G. Parisi, and Y.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
  - [11] D. D. Vvedensky, *Phys. Rev. E* **67**, 025102 (2003).
  - [12] T. J. Oliveira and F. D. A. Aarao Reis, *Phys. Rev. E* **76**, 061601 (2007).
  - [13] T. Halpin-Healy and Y. Zhang, *Phys. Rep.* **254**, 215 (1995).
  - [14] F. D. A. Aarao Reis, *Phys. Rev. E* **63**, 056116 (2001).
  - [15] B. Farnudi and D. D. Vvedensky, *J. Phys.: Conf. Series* **286**, 012031 (2011).
  - [16] S. N. Majumdar, *Les Houches* **85**, 179 (2007).
  - [17] T. J. da Silva and J. G. Moreira, *Phys. Rev. E* **63**, 041601 (2001).
  - [18] K. A. Takeuchi and M. Sano, *J. Stat. Phys.* **147**, 853 (2012).
  - [19] J. Krug, P. Meakin, and T. Halpin-Healy, *Phys. Rev. A* **45**, 638 (1992).
  - [20] M. Prahofer and H. Spohn, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4882 (2000).