

Pablo Menezes Amorim

Perfil transformado de altura média: análise dos expoentes de escala e sua conexão com a morfologia que resulta de simulação computacional da microscopia de força eletrostática

Salvador- Bahia, Brasil

2023

Universidade Federal da Bahia
Instituto de Física

Pablo Menezes Amorim

Perfil transformado de altura média: análise dos expoentes
de escala e sua conexão com a morfologia que resulta de
simulação computacional da microscopia de força
eletrostática

Dissertação apresentada ao
Instituto de Física como parte dos
requisitos exigidos para obtenção
do título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Thiago
Albuquerque de Assis

Coorientador: Dr. Edwin Edgar
Mozo Luis

Salvador- Bahia, Brasil

2023

Agradecimentos

Gostaria de agradecer aos meus pais, irmãos e namorada pelo suporte e compreensão durante minha jornada.

Ao meu orientador Prof.Dr. Thiago Albuquerque de Assis, gostaria de agradecer pelo tempo gasto durante as inúmeras reuniões que ocorreram nestes últimos dois anos, pela paciência, compreensão e pelos ensinamentos.

Ao meu coorientador Dr. Edwin E. Mozo Luis, gostaria de agradecer pela inestimável ajuda na área de programação, por sempre estar disponível, pela paciência e por sempre sanar minhas dúvidas.

Gostaria também de expressar meus agradecimentos ao Prof. Fábio A. Reis, pelas frutíferas discussões a respeito dos expoentes de colapso.

Finalmente, mas não menos importante, gostaria de agradecer ao programa de Pós-Graduação em Física da UFBA, ao Grupo de Física de Superfícies e Materiais (GSUMA), ao Grupo de Física Estatística e Sistemas Complexos (FESC) e à CAPES, pelo suporte financeiro.

Sumário

Capítulo 1	3
Introdução.....	3
Capítulo 2:	7
Revisão bibliográfica	7
2.1 Equação de Langevin:.....	7
2.2 Conceitos de escala e Enrugamento cinético.....	9
2.3 O expoente de rugosidade local.....	13
2.4 Função de Auto-correlação Altura-Altura	14
2.5 Modelo de deposição aleatória.....	15
2.6 A classe EW (Edwards e Wilkinson).....	17
2.6.1 Modelo de Family.....	19
2.7 A classe KPZ (Kardar, Parisi e Zhang).....	21
2.7.1 O modelo DB (Deposição Balística)	22
2.7.2 O modelo de Etching	24
2.8 A classe VLDS (Villain, Lai e Das Sarma)	26
2.8.1 O modelo CRSOS	27
2.9 Método de correção para os expoentes de escala	28
Capítulo 3:	33
Resultados e discussões	33
3.1 Origens da correção de escala em modelos de rede	33
3.2 Técnica TMHP (Transformed mean height profile).....	34
3.3 Conexão do TMHP com o AFM.....	38
3.2 Aplicação da técnica TMHP em modelos discretos da classe KPZ	46
3.3 Aplicação da técnica TMHP para o modelo de rede CRSOS.....	64
Capítulo 4:	68
Conclusões	68
Apêndice.....	72
Referências.....	73

Lista de Siglas e Símbolos

Sigla	Definição
AFM	Atomic Force Microscopy (Microscopia de Força Atômica)
DB	ballistic deposition (deposição balística)
CRSOS	conserved restricted solid-on-solid (sólido sobre sólido conservativo)
d	dimensão do substrato
EW	classe de Edward-Wilkinson
KPZ	classe de Kardar-Parisi-Zhang
RD	random deposition (deposição aleatória)
h	altura de uma coluna
FV	relação de escala de Family Vicsek
MBE	Molecular Beam Epitaxy (Epitaxia por Feixe Molecular)
r	tamanho lateral da janela ou escala de observação
L	tamanho lateral da rede discreta
VLDS	classe de Villain-Lai-Das Sarma
$W(L, t)$	largura da interface (ou rugosidade global)
w_{sat}	rugosidade de saturação
$\omega(r, t)$	rugosidade local
TMHP	Transformed Mean Heigh Profile (Perfil Transformado de Alturas Médias)
b_{opt}	bin ótimo
p_c	ponto de crossover
$\langle \dots \rangle$	valor médio de uma variável aleatória discreta
DFA_n	análise de flutuações destendenciadas
ODFA_n	análise ótima de flutuações destendenciadas
z	expoente dinâmico
z_c	expoente de coarsening
α	expoente de rugosidade global

α_{eff}	expoente de rugosidade local efetivo
α_L	expoente de rugosidade efetivo
β_L	expoente efetivo de crescimento
β	expoente de crescimento global
Γ	função de autocorrelação altura- altura
η	ruído Gaussiano
ξ	comprimento de correlação lateral ou comprimento característico
$F_e(x)$	força externa
$P(x, t)$	distribuição de probabilidade
$F(t)$	força aleatória
δ	função delta de Dirac
B	amplitude de flutuações da variável estocástica $F(t)$
m	massa da partícula Browniana
a	constante relacionada a força de arrasto no fluido
w_i	rugosidade intrínseca
λ	expoente de colapso (para o eixo vertical)
ν	expoente de colapso (para o eixo horizontal)
$S_R[h](x)$	operador de suavização
$g(x)$	função que caracteriza a ponta da sonda de raio R no AFM (modo contato)
φ	expoente de correção de escala (para o expoente β)
Δ	expoente de correção de escala (para o expoente α)
λ_1	coeficiente do termo não linear da equação KPZ
λ_4	coeficiente do termo não linear da equação VLDS
ν_1	coeficiente da tensão superficial das equações KPZ e EW
ν_4	coeficiente da derivada de quarta ordem da equação VLDS
δh	incremento não determinístico de altura
ν_4	coeficiente da derivada de quarta ordem da equação VLDS
d_c	<i>dimensão crítica</i>
v	velocidade da partícula Browniana
D	amplitude das flutuações da interface

Resumo

O crescimento de superfícies constitui um importante fenômeno fora do equilíbrio e possui diversas aplicações tecnológicas, a exemplo dos processos de manufatura de filmes finos. Algumas informações a respeito desse fenômeno podem ser alcançadas através de simulações computacionais utilizando modelos de rede, via método Monte Carlo Cinético. Nesta dissertação, serão expostos resultados de simulações computacionais para modelos discretos ditos pertencentes as classes de universalidade da equação Kadar-Parisi-Zhang (KPZ) e Villain-Lai-Das Sarma (VLDS). Interfaces que apresentam enrugamento podem apresentar certas quantidades estatísticas que são invariantes sob transformações de escala, definindo expoentes de escala. Contudo, os expoentes de escala são bem definidos no limite hidrodinâmico, em razão disto, a obtenção destes expoentes pode ser sujeita a efeitos de tempo e tamanho finito. Além disto, é reportado na literatura a existência de uma rugosidade intrínseca que modifica a relação de escala Family-Vicsek (FV), sendo essa uma das origens das correções de escala para certos modelos. Para contornar a ação destes efeitos na obtenção dos expoentes que caracterizam a escala, foram desenvolvidos métodos de correção de escala, a citar o método da extrapolação. No presente trabalho, propõe-se uma técnica aplicada a modelos de rede, que auxilia na obtenção do expoente de rugosidade local. A técnica denominada de TMHP (Transformed Mean Heig Profile), consiste na divisão do perfil irregular discreto em diversos bins (compartimentos de mesmo tamanho), para produzir um perfil transformado de alturas médias. O perfil gerado pela técnica TMHP mostrou-se capaz de atenuar as flutuações estocásticas de alturas nas regiões de vales e picos, gerando um perfil mais suave e reduzindo o efeito da rugosidade intrínseca na escala. Constatou-se, ademais, para tamanhos de compartimento inferiores ao comprimento de correlação do perfil original, que o perfil gerado pela técnica possui equivalência com o perfil original, no que diz respeito aos expoentes de escala. Uma característica da técnica TMHP é a existência de um bin ótimo, que consiste no tamanho de bin capaz de fornecer uma melhor correção para o expoente de rugosidade local. Tratando-se de modelos discretos pertencentes à classe KPZ, os resultados mostram que o expoente de crescimento global permanece inalterado para perfis gerados pelo TMHP através do bin ótimo. Contudo, para tamanhos de bins que superam o comprimento de correlação do perfil original, o expoente de crescimento reportado pela técnica TMHP é consistente com aquele de um crescimento decorrelacionado. Finalmente, será discutido sob que condições existe uma conexão entre o perfil transformado e aquele reportado através de simulações computacionais que procuram representar um tipo específico microscopia de força atômica (Atomic Force Microscopy - AFM), denominado microscopia de força eletrostática.

Abstract

Surface growth is an important out-of-equilibrium phenomenon and has several technological applications, such as in the production of thin films. Some information about this phenomenon can be obtained by computer simulations using lattice models and the kinetic Monte Carlo method. In this dissertation, we present the results of computer simulations for discrete models that are supposed to belong to the universality class of Kadar-Parisi-Zhang (KPZ) and Villain-Lai-Das Sarma (VLDS) equations. Interfaces that exhibit roughening may have certain statistical quantities that are invariant under scaling transformations and define scaling exponents. However, the scaling exponents are well defined in the hydrodynamic limit, so the determination of these exponents may depend on time and finite size effects. In addition, the literature reports the existence of intrinsic roughness that alters the Family-Vicsek (FV) scaling, which is one of the reasons for scaling corrections in certain models. To circumvent these effects in determining the exponents, scaling correction methods have been developed, in particular the extrapolation method. In this present work, we propose a technique applied to lattice models that can be used to determine the local roughness exponent. This technique called Transformed Mean Height Profile (TMHP) consists in dividing the discrete irregular profile into several bins (sections of the same size) to obtain a transformed profile of average heights. The profile generated by the TMHP technique was able to attenuate the stochastic variations of the heights in the areas of valleys and peaks, producing a smoother profile and reducing the effects of intrinsic roughness. In addition, for compartment sizes smaller than the correlation length of the original profile, the profile produced by the technique is equivalent to the original profile in terms of scale exponents. A distinctive feature of the TMHP technique is the existence of an optimal bin, i.e., the bin size that allows for a better correction of the local roughness exponent. In the case of discrete models belonging to the KPZ class, the results show that the global growth exponent remains unchanged for profiles generated with TMHP via the optimal bin size. However, for bin sizes exceeding the original correlation length of the profile, the growth exponent reported by the TMHP technique is consistent with that of uncorrelated growth. Finally, we discuss the conditions under which there is a correlation between the transformed profile and that reported through computational simulations that seek to represent a specific type of atomic force microscopy (Atomic Force Microscopy - AFM), called electrostatic force microscopy.

Capítulo 1

Introdução

O crescimento de superfícies constitui, frequentemente, um fenômeno fora do equilíbrio e possui vasta aplicação tecnológica. Uma das técnicas que tem tido destaque na fabricação de filmes finos é a epitaxia de feixe molecular, ou *Molecular Beam Epitaxy* (MBE), utilizada principalmente na manufatura de dispositivos eletrônicos como chips, diodos, transistores e semicondutores crescidos sobre substratos de Silício [1-4]. No entanto, o estudo da dinâmica de interfaces vai além de aplicações eletrônicas, estando presente em diversos fenômenos naturais, como infiltração de líquido em meios porosos [5], crescimento de culturas de bactérias [6-8], ou até mesmo na evolução da deposição de neve durante uma nevasca [9].

Essa diversidade de fenômenos é oriunda das diversas interações microscópicas entre os constituintes fundamentais da matéria durante os processos de deposição [10]. Estes fenômenos fora do equilíbrio apresentam algumas quantidades estatísticas que, no limite hidrodinâmico, permanecem invariantes sob transformação de escala. Em razão disto, observa-se a existência de expoentes de escala [11,12]. Embora os exemplos supracitados sejam muito diferentes entre si, eles podem possuir relações de escala em comum, possibilitando a introdução do conceito de universalidade. Essas relações de escala em comum se refletem em um mesmo conjunto de expoentes de escala que podem levar à distribuição de alturas com as mesmas características. Sendo assim, mesmo diante de sistemas aparentemente sem qualquer conexão, eles podem possuir propriedades estatísticas semelhantes e serem classificados em classes de universalidade.

Simulações computacionais utilizando o método Monte Carlo Cinético, para modelos de rede [13-15], são ferramentas amplamente utilizadas para alcançar algumas quantidades estatísticas de interesse, a citar a rugosidade global quadrática. Através do conceito de universalidade, é possível conectar os resultados obtidos através de simulações envolvendo tais modelos, com diversos fenômenos. Em razão disto, os modelos de rede (ou modelos discretos) [16] podem fornecer detalhes importantes a respeito da dinâmica de interfaces, detalhes estes, que muitas vezes são de difícil acesso experimental.

A investigação da dinâmica de uma interface também pode ser realizada através de equações diferenciais estocásticas. Tais equações são derivadas levando em consideração determinados princípios de simetria. Vale ressaltar que as equações contínuas descrevem a evolução temporal da altura da

interface em grandes escalas, negligenciando assim o que ocorre em pequenas escalas. O método de derivação destas equações consiste em considerar as simetrias do sistema. Através da equação de crescimento é possível obter expoentes de escala que permitem classificar os fenômenos descritos em determinadas classes de universalidade, de maneira similar aos modelos de rede. Em razão disto, será corriqueiro classificar os modelos de rede em determinadas classes de universalidade descritas por equações diferenciais estocásticas, a citar: equação *Kardar-Parisi-Zhang* (KPZ) [17], equação *Edwards e Wilkinson* (EW) [18] e equação *Villain, Lai, and Das Sarma* (VLDS) [19,20]. Estas equações serão individualmente discutidas no próximo capítulo, bem como os modelos de rede bem estabelecidos que pertencem a uma mesma classe universalidade.

Por outro lado, a topografia de uma interface pode ser investigada através da técnica de microscopia de força atômica *Atomic Force Microscopy* (AFM), ou microscopia de varredura por tunelamento, ambos exemplos de microscopia de varredura por sonda *Scanning Probe Microscopy* (SPM) [21-23]. No AFM, ocorre a interação de uma ponta com a superfície da amostra. Após o processo de varredura da interface, gera-se um perfil que pode reproduzir as flutuações de altura do perfil original. Contudo, existem alguns fatores que podem influenciar na resolução da imagem gerada pelo AFM. Este é o caso, por exemplo, do efeito produzido pelo tamanho finito da ponta. [24]. A ponta do AFM no modo não contato, onde as interações eletrostáticas podem ser as predominantes, produz um efeito de suavização que limita a qualidade da imagem gerada pela varredura. Portanto, alguns detalhes da superfície investigada, como vales profundos ou regiões inclinadas, não conseguem ser capturados. Com o avanço do SPM, surgiram outros tipos de varreduras que não se baseiam no contato direto da ponta da sonda com a amostra. Um exemplo de AFM não contato é a microscopia de força eletrostática *Electrostatic Force Microscopy* (EFM), onde há interação de natureza eletrostática entre a ponta e a amostra. Na Fig.1.1(a), observa-se uma representação do AFM no modo contato, mostrando o movimento de flexão do cantilever durante a varredura de uma amostra, devido a existência de forças repulsivas de contato. A Fig.1.1(b) mostra um gráfico do potencial inter atômico de interação versus distância, onde a região azul representa uma força repulsiva utilizada no AFM modo contato. A região verde representa uma força atrativa utilizada no modo não contato. Uma análise da Fig.1.1(b) revela que em curtas distâncias a interação entre os átomos da ponta e da amostra é repulsiva, mas em longas distâncias é atrativa. No capítulo 3 dessa dissertação será realizada uma discussão mais detalhada a respeito dessa técnica, bem como suas limitações.

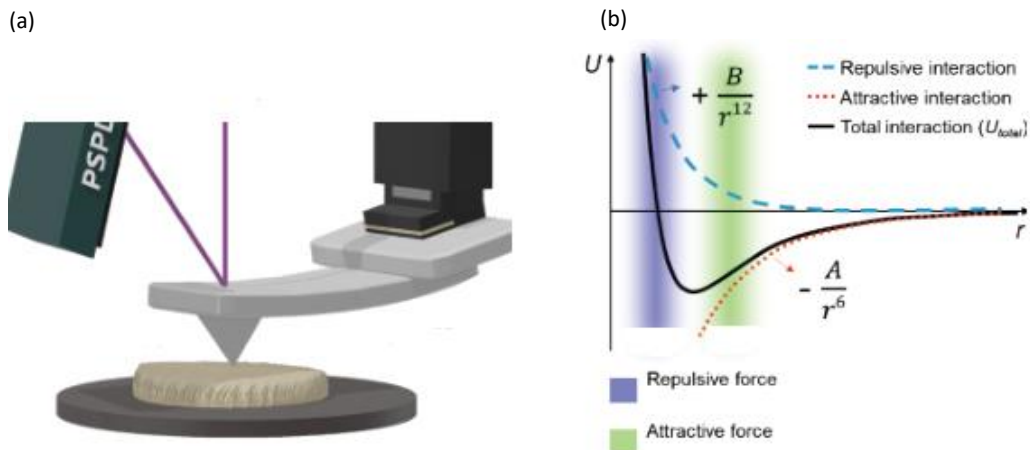


Fig.1.1: (a) Representação do movimento do cantilever sobre a amostra; (b) gráfico da energia potencial de interação versus distância, a região azul representa o comportamento repulsivo da força no intervalo $10^{-5}N \leq F \leq 10^{-3}N$, utilizada no modo de contato. Enquanto que na região verde a força atrativa está no intervalo $10^{-12}N \leq F \leq 10^{-9}N$, utilizada no modo de não contato. A curva preta é o resultado de uma combinação de forças atrativas de longo alcance e repulsivas de curto alcance, denominada potencial de Lenard Jones. Figura retirada de <https://bityli.com/2A80F>.

Alguns trabalhos envolvendo simulação numérica de modelos discretos têm reportado expoentes de escala que reforçam a equivalência destes modelos com sua respectiva classe de universalidade, a exemplo do modelo de deposição balística [25-27]. Contudo, estes resultados indicam a necessidade da implementação de um método para correção da escala. Os expoentes de escala são bem definidos no limite hidrodinâmico, no entanto, as interfaces possuem tamanho finito e não dispõem de tempo ilimitado para crescer. Portanto, a obtenção dos expoentes de escala é sujeita a efeitos de tempo e tamanho finito [28-30]. Diante disto, a partir de simulações computacionais em larga escala, é possível alcançar um regime onde estes efeitos são atenuados [31]. Ademais, existem outros fatores que podem introduzir fortes correções de escala, que estão relacionadas a presença de uma rugosidade intrínseca [32], cuja principal contribuição advém das flutuações no aumento de altura durante o processo de deposição [33].

Motivados pelos aspectos discutidos acima, será introduzido nesta dissertação a técnica do perfil transformado de alturas médias (*Transformed Mean Heigh Profile-TMHP*). A técnica se baseia na divisão da superfície em bins (caixas de mesmo tamanho) [33], de modo que o perfil original é transformado a partir do cálculo das alturas médias em cada bin. O TMHP mostrou-se uma técnica que pode auxiliar na obtenção de correções de escala, em especial para o expoente de rugosidade local α_{eff} . Será evidenciado a existência de um bin

ótimo, que consiste em um tamanho de bin capaz de fornecer a melhor correção para a escala. A técnica TMHP mostrou-se capaz de reduzir as flutuações estocásticas de altura nas regiões de vales profundos e picos. Em pequenas escalas, as reduções das flutuações de altura nas regiões de vales diminuem a rugosidade intrínseca, promovendo uma correção no *scaling*. Além disto, observa-se que o TMHP suaviza a rugosidade local do perfil, uma vez que também reduz as flutuações de alturas nas regiões de picos. A técnica foi aplicada aos modelos de Etching [34,35], e da Deposição Balística [27], ambos pertencentes à classe de universalidade KPZ. Também foi averiguado que a aplicação do TMHP no modelo CRSOS [36], dito pertencente à classe VLDS, produz limitações na obtenção dos expoentes de escala. Para além do expoente de rugosidade local, a técnica TMHP também se mostrou capaz de obter o expoente de crescimento global β , em concordância com o esperado para a classe KPZ, desde que o tamanho do bin seja menor que o comprimento de correlação da interface original.

Ademais, será feita uma análise de resultados de simulações computacionais que buscam representar a microscopia de força eletrostática, que consiste em um tipo de AFM no modo não contato. Constatou-se que existe uma suposta correlação entre a morfologia alcançada por simulações para o AFM e o perfil gerado pela técnica TMHP [37]. Diante disto, a técnica TMHP revelou-se uma ferramenta que pode auxiliar na obtenção de correções no *scaling*, além de reportar alguns efeitos induzidos pela ponta da sonda, que afetam a qualidade da imagem gerada pela varredura. Constatou-se que a varredura do AFM no modo não contato, de maneira semelhante ao modo de contato, produz um efeito de suavização. Devido a semelhança entre o perfil gerado pelo AFM e o TMHP, será mostrado que o mecanismo de suavização promovido pela ponta do AFM no modo não contato, é análogo ao efeito da redução das flutuações de altura nas regiões de picos promovida pela técnica TMHP.

Por fim, esta dissertação é organizada da seguinte forma: no capítulo 2, será apresentada uma revisão bibliográfica que abordará aspectos gerais, como conceito de escala, enrugamento cinético, classes de universalidade e os modelos de rede que serão abordados ao decorrer do trabalho. A técnica TMHP será introduzida no capítulo 3, que também constará dos resultados de sua aplicação na obtenção do expoente efetivo de rugosidade local e do expoente de crescimento global, em modelos discretos pertencentes à classe KPZ e VLDS. Ainda no capítulo 3, serão discutidos os resultados de simulações computacionais que indicam a equivalência entre o perfil gerado pela leitura do AFM no modo não contato, com o perfil gerado pela técnica TMHP. O último capítulo constará das conclusões, além de um breve compêndio acerca dos principais resultados obtidos e perspectivas de trabalhos futuros envolvendo a técnica TMHP. A dissertação conta ainda com um apêndice, que estabelece uma comparação entre a técnica TMHP e o perfil de alturas máximas, para a obtenção do expoente de rugosidade local.

Capítulo 2

Revisão bibliográfica

Neste capítulo, se discutem as propriedades de escala da rugosidade global e local das interfaces crescidas sobre um substrato com rugosidade inicial nula. Revisita-se o método de extrapolação desenvolvido por Reis [30] para correção dos expoentes de escala. Os resultados aqui expostos são referentes a simulações computacionais baseadas no método Monte Carlo Cinético. Por fim, serão explorados modelos contínuos, que possibilitam a compreensão a respeito das classes de universalidades.

2.1 Equação de Langevin

O fenômeno de crescimento de superfícies é um processo fora do regime de equilíbrio, consistindo de uma situação em que uma interface está sujeita a um fluxo externo de partículas. Vários processos com essa característica podem ser modelados através de uma equação de Langevin [38]. Esta equação foi proposta para descrever o movimento de uma partícula Browniana imersa em um meio viscoso, sujeita a uma força dissipativa proporcional a velocidade, na presença de um ruído descorrelacionado temporalmente que surge devido as colisões aleatórias da partícula com as do fluido. Um típico exemplo deste fenômeno é o pólen em suspensão no fluido, estudado inicialmente na referência [39], cuja dinâmica pode ser descrita pela seguinte equação de movimento:

$$m \frac{dv}{dt} = -av + F(t), \quad (2.1)$$

onde o termo a está diretamente relacionado à presença de uma força de arrasto devido ao caráter viscoso do meio. $F(t)$ é uma força aleatória que varia no tempo, e, portanto, uma variável estocástica que possui média nula $\langle F(t) \rangle = 0$. Além disto, o impacto da partícula Browniana com as que estão presentes no fluido é suposto ser independente e descorrelacionado (não é possível prever

em que instante ocorrerá determinada colisão), então é razoável considerar $\langle F(t)F(t') \rangle = B\delta(t - t')$, onde B representa a amplitude das flutuações de $F(t)$.

Reescrevendo a equação (2.1), dividindo ambos os membros pela massa, obtém-se:

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \zeta(t), \quad (2.2)$$

onde $\gamma = a/m$ e $\zeta(t) = F(t)/m$. A variável estocástica $\zeta(t)$, também denominada de ruído branco, desfruta das mesmas propriedades estatísticas da variável $F(t)$. Considerando que o sistema Browniano seja composto por uma partícula livre, sujeita a uma força de arrasto e outra força externa de magnitude $F_e(x)$, a equação que descreve o movimento da partícula, será:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F_e(x) - a \frac{dx}{dt} + F(t). \quad (2.3)$$

Considerando o regime em que a massa m da partícula seja suficientemente pequena, então a equação acima se torna:

$$\begin{aligned} a \frac{dx}{dt} &= F_e(x) + F(t), \\ \frac{dx}{dt} &= f(x) + \eta(t), \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde $f(x) = F_e(x)/a$ e $\eta(t) = F(t)/a$, a variável estocástica $\eta(t)$, possui as mesmas propriedades estatísticas supracitadas. Associada a cada equação de Langevin existe uma correspondente equação de evolução da distribuição de probabilidade, chamada equação de Flokker-Planck. Uma possível dedução advém da discretização da equação de Langevin. Em seguida é definida sua função característica, para mais detalhes consultar as referências [38,40]:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} [f(x)P(x, t)] + \frac{\phi}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t), \quad (2.5)$$

onde $\phi = B/m^2$. A equação de Flokker-Planck (2.5), descreve a evolução temporal da distribuição de probabilidade. No caso específico em que $f(x) = 0$, na ausência de forças externas ao sistema, obtém-se a equação da difusão.

É possível construir uma equação de Langevin através da determinação de um conjunto de assertivas probabilísticas para uma interface sujeita a um fluxo de partículas. Nesta situação, a variável estocástica da equação será o campo de alturas ao longo da superfície. A construção destas equações contínuas possibilita a compreensão a respeito das classes de universalidades.

2.2 Conceitos de escala e Enrugamento cinético

Interfaces crescidas através de processos de deposição de partículas exibem algumas características interessantes, a exemplo da invariância de escala e auto afinidade. A análise da morfologia de uma interface depende da escala de observação e de uma série de fatores, que derivam de leis microscópicas [11]. Simulações computacionais utilizando o método de Monte Carlo Cinético [41-43] são relevantes para a análise das propriedades de escala e descrição dos processos microscópicos que ocorrem na interface durante a deposição.

Através de uma equação diferencial estocástica é possível investigar a dinâmica de evolução de uma interface, o que permitirá compreender os principais mecanismos que regem a morfologia da interface. O enrugamento de uma interface é um fenômeno encontrado em uma grande quantidade de sistemas. Sua origem advém do movimento da interface regido pela ação de flutuações, que podem ser de natureza térmica, cinética ou caótica [12].

Durante o processo de crescimento de uma interface, via deposição de matéria, observa-se que algumas quantidades estatísticas mensuráveis exibem uma dependência funcional, gerando uma relação de escala. Mesmo diante das distintas interações microscópicas que originam diferentes interfaces, é possível classificar sistemas que aparentemente não exibem nenhuma conexão entre si, como por exemplo uma frente de chama [44], ou o crescimento de um tumor [45], em uma mesma classe de universalidade. Nestes casos, apesar dos sistemas apresentarem naturezas distintas, podem possuir certas quantidades estatísticas em comum, a citar os expoentes de escala.

Os mecanismos microscópicos presentes durante a deposição e agregação de matéria em um substrato podem ser investigados via simulação computacional com uso de modelos discretos. Para compreender e caracterizar a evolução temporal das flutuações de altura na interface destes modelos, introduz-se uma grandeza física chamada rugosidade global $w(L, t)$, que mede a largura característica da interface. A referida grandeza é definida como o desvio padrão das alturas e representada pela equação:

$$w(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h(i, t) - \bar{h}(t)]^2}, \quad (2.6)$$

onde $\bar{h}(t)$ é a média da variável aleatória discreta altura, e $h(i, t)$ indica a altura da coluna i no instante t . Resultados presentes nas referências [46,47], mostram como a rugosidade global diminui à medida que a temperatura aumenta,

revelando a importância do controle da temperatura durante o processo de fabricação de filmes finos. Contudo, este não é um resultado geral, próximo da transição do enrugamento ocorre o oposto, conforme exposto em [11].

Considerando o caso de um substrato plano que recebe um fluxo constante de partículas, durante os instantes iniciais, as colunas crescem sem vínculos. Através da ação de um ruído que introduz um ingrediente aleatório ao crescimento, a condição inicial se perde à medida que a superfície começa a enrugar. As partículas recém-chegadas começam a produzir vínculos durante o processo de agregação nas colunas, a informação acerca destes vínculos entre vizinhos começa a se propagar pelo sistema. Surge então um comprimento de correlação, ξ_{\parallel} , que cresce paralelamente ao tamanho lateral do sistema, L . Quando o comprimento de correlação se torna da ordem do tamanho lateral do sistema a interface fica completamente correlacionada. A Fig.2.1(a), que mostra a rugosidade global em função do tempo, observa-se um tempo de saturação ou tempo de crossover, t_x , que divide a rugosidade em duas regiões com comportamentos distintos.

Nos instantes iniciais $t \ll t_x$, a rugosidade escala como uma potência do tempo:

$$w(L, t) \sim t^{\beta}, \quad (2.7)$$

onde β é chamado expoente de crescimento global, e reflete a dependência da rugosidade com o tempo. Na Fig.2.1(a), observa-se que após um determinado tempo t_x , a rugosidade não exibe mais dependência com o tempo (regime estacionário), sendo designada por $w_{sat}(L)$. A rugosidade global no regime de saturação escala como potência do tamanho lateral do sistema, de maneira que:

$$w_{sat}(L) \sim L^{\alpha}, \quad (2.8)$$

onde α é chamado de expoente de rugosidade global, e reflete a dependência funcional da rugosidade com o tamanho do sistema. O tempo de crossover t_x , também cresce à medida que o tamanho L do sistema aumenta, estabelecendo uma relação da forma:

$$t_x \sim L^z, \quad (2.9)$$

o expoente z é conhecido como expoente dinâmico. Ao fazer o colapso de todas as curvas, sob a forma $\log \left[\frac{w(L, t)}{L^{\alpha}} \right] X \log \left[\frac{t}{t_x} \right]$, percebe-se que existe uma dependência entre estes expoentes de escala. Independentemente do tamanho do sistema, sob essa relação, todas as curvas vão atingir a saturação simultaneamente com um valor similar. Essa é conhecida como relação de escala de Family-Vicsek (FV) [48]:

$$w(L, t) \sim L^{\alpha} f \left(\frac{t}{L^z} \right). \quad (2.10)$$

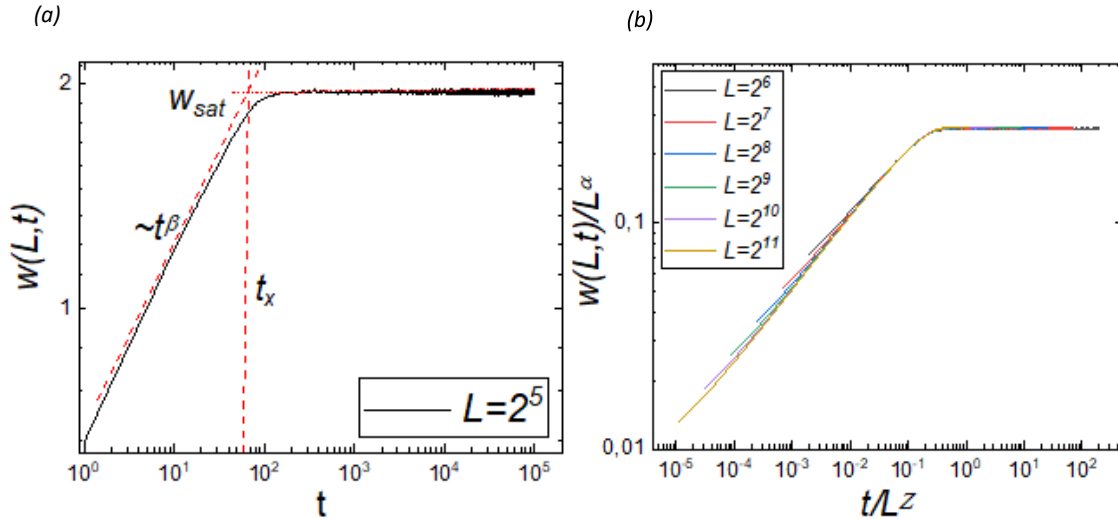


Figura 2.1: (a) Ilustração do enrugamento cinético de uma superfície pertencente ao modelo CRSOS em 1 + 1 dimensões, para um tempo de 10^5 monocamadas, mostrando o regime de crescimento da interface bem como a região de saturação após o tempo de crossover. (b) ilustração do colapso das curvas de rugosidade global para o modelo de Etching, seguindo a relação de escala de FV, para diferentes tamanhos laterais, utilizando expoentes de escala obtidos através de simulação computacional.

Na Fig. 2.1. a, nota-se que ao determinar o ponto de crossover $(t_x, w(t_x))$, e utilizando esse ponto nas equações (2.7) e (2.8), $t_x^\beta \sim L^\alpha$, portanto obtém-se:

$$\beta z = \alpha . \quad (2.11)$$

A relação acima é válida para modelos de rede que obedecem a relação de escala FV e estabelece uma dependência entre os três expoentes que caracterizam a escala. Discutiu-se anteriormente a existência de um comprimento de correlação $\xi_{||}$, que pode ser interpretada como a distância ao longo das direções do substrato em que uma altura está correlacionada com a outra devido aos vínculos com seus vizinhos [10-11]. Quando este comprimento se torna da ordem do tamanho do sistema ($\xi_{||} \sim L$), toda a superfície se torna correlacionada e observa-se que a rugosidade atingiu a saturação. Então é plausível considerar que $\xi_{||}$ escala com o tempo de crossover, de modo que:

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

A morfologia de uma interface que apresenta enrugamento cinético é melhor descrita através de uma linguagem natural, que surge da definição de fractais. Fractais são objetos que exibem a propriedade de invariância de escala. Eles são divididos em auto-semelhantes, quando são invariantes sob uma transformação isotrópica de escala, ou auto-afins, quando apresentam invariância através de uma transformação anisotrópica. Na Fig.2.2(a-d), é mostrado o triângulo de Sierpinski, um exemplo de fractal matemático que exhibe a propriedade de auto semelhança, onde após cada processo iterativo k , o ponto médio de cada lado do triângulo origina um vértice de um novo triângulo. A

maioria das superfícies crescidas que apresentam enrugamento são fractais auto afins, sendo, portanto, invariantes sob transformação anisotrópica de escala. Neste caso, ao aplicar uma transformação de escala que seja diferente na direção horizontal e na vertical, observa-se invariância de propriedades estatísticas. Um exemplo de transformação de escala para um fractal auto afim é fazer uma reescala por um fator b , na direção horizontal, em que x deve reescalar como $x \rightarrow bx$, e na vertical a altura se modifica de maneira que $h \rightarrow b^\alpha h$. Essa transformação produz uma superfície com geometria estatisticamente indistinguível do todo. Na Fig.2.2(e) é exposto um exemplo de um perfil auto-afim, que através de uma transformação de escala permanece estatisticamente indistinguível do todo.

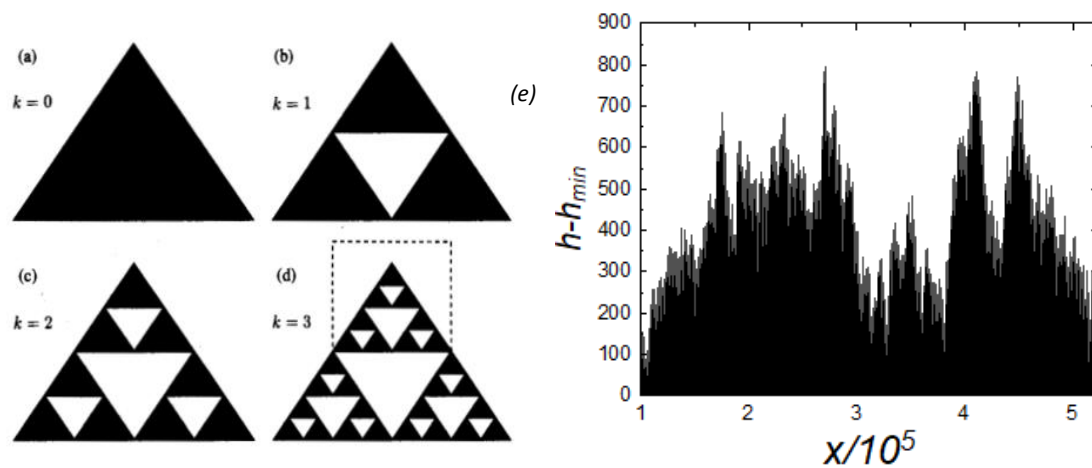


Fig2.2: (a-d) ilustração de um fractal matemático auto semelhante chamado triângulo de Sierpinski. Após sucessivos processos iterativos cada geração se sobrepõe a anterior produzindo um padrão de repetição. Nota-se que para cada passo, a área total do triângulo diminui à medida que o perímetro do triângulo aumenta. Ilustração retirada de [11]; (e) superfície gerada computacionalmente para o modelo de Etching em $1 + 1$, que representa um fractal auto afim.

As simulações computacionais apresentadas nesta dissertação referem-se a modelos de rede na dimensão $1 + 1$, sendo que o primeiro termo da soma designa a dimensão do substrato. Cada partícula depositada equivale a um quadrado, cuja aresta corresponde a um parâmetro de rede. Por fim, a unidade de tempo corresponde aquela associada a uma monocamada depositada, ou seja, L^d partículas depositadas sobre o substrato ou filme.

2.3 O expoente de rugosidade local

Na seção anterior foi definido um conjunto de expoentes capazes de caracterizar a escala e determinar classes de universalidades. As equações (2.7 – 8) mostram que a rugosidade global do sistema cresce como uma potência do tempo. Por outro lado, o expoente de rugosidade, α , pode fornecer informações sobre as flutuações que ocorrem em grandes ou pequenas escalas [10]. A relação de escala FV informa que as propriedades estatísticas de superfícies auto-afins devem ser as mesmas em pequenas ou grandes escalas [49]. Mas resultados presentes em [50-51], expõem que há casos em que a relação de escala FV não é satisfeita e observa-se a existência de uma escala anômala. Para analisar as flutuações de altura que ocorrem em pequenas escalas é necessário calcular a rugosidade localmente [52,53], para tal, é definido a rugosidade local como:

$$\omega_i^2(r, t) = \langle h^2 \rangle_i - \langle h \rangle_i^2, \quad (2.13)$$

onde o símbolo $\langle \dots \rangle_i$ denota o cálculo da altura média na i -ésima janela de tamanho r do perfil. A rugosidade quadrática local $\omega_i^2(r, t)$, é calculada para um particular valor de t , para diferentes amostras são realizadas médias sobre as flutuações de alturas dentro de uma janela. Ademais, quando o tamanho da janela se torna da ordem do tamanho lateral do sistema, a rugosidade local coincide com a rugosidade global. Em particular é esperado que enquanto o tamanho lateral das janelas, r , seja menor que o comprimento de correlação, a rugosidade local se comporte como a rugosidade global no regime de saturação. Quando às flutuações globais se comportam estatisticamente semelhantes às flutuações locais, implicando que os o expoente de rugosidade local seja igual ao global ($\alpha = \alpha_{loc}$), a relação de escala de FV é satisfeita, caso contrário, observa-se existência de rugosidade anômala. Um estudo realizado em [88], confirma a existência de escala anômala aparente em modelos com presença de difusão, não sendo observado a existência de escala anômala assintótica.

Para o caso de escala normal o colapso de curvas da rugosidade local é realizado através de uma modificação na relação de escala FV [48], dada por:

$$\omega(r, t) \sim t^\beta \left(\frac{l}{t^{1/z}} \right). \quad (2.14)$$

2.4 Função de Auto-correlação Altura-Altura

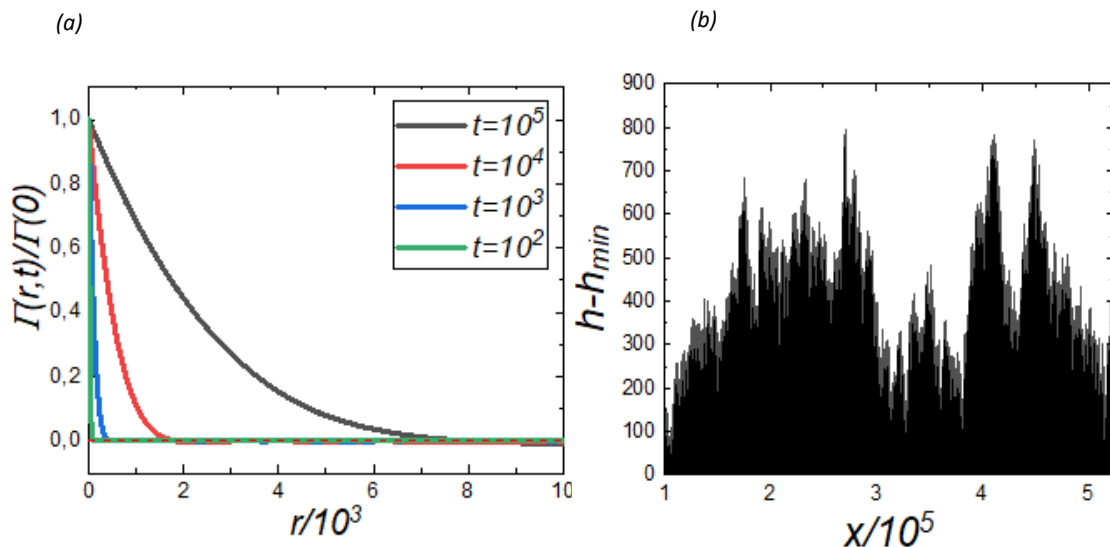
Além da rugosidade, outra grandeza importante na análise e descrição da morfologia de uma interface é a função de auto-correlação altura-altura. A função de auto-correlação altura-altura $\Gamma(r, t)$ é dada por:

$$\Gamma(r, t) = \langle \tilde{h}(r_0 + r, t) \tilde{h}(r_0, t) \rangle, \quad (2.15)$$

onde $\tilde{h} = h - \bar{h}$, com \bar{h} sendo a altura média, e r_0 uma dada posição de referência. Em $r = 0$ a função de auto-correlação fornece o valor da rugosidade global quadrática, que é utilizada para normalizar $\Gamma(r, t)$. O comportamento da função $\Gamma(r, t)$ é modelado pelo tipo de superfície analisada. O tamanho característico também obedece a uma lei de potência e cresce como potência do tempo, de modo que:

$$\xi_{0,m} \sim t^{\frac{1}{z_c}}, \quad (2.16)$$

onde z_c é conhecido na literatura como expoente de coarsening [57]. Em perfis auto-afins este expoente é equivalente ao expoente dinâmico. Conforme exposto na *Fig. 2.3(c - d)*, para perfis onde ocorre difusão e que apresentam morfologia de morros, observa-se um decaimento da curva seguido por um comportamento oscilatório em torno do eixo inicial. Para perfis auto-afins $\Gamma(r, t)$ decresce com o aumento de r , *Fig. 2.3(a - b)*. A partir da função de auto-correlação analisa-se morfologias que apresentam tamanho característicos. O primeiro mínimo, ξ_m , ou primeiro zero, ξ_0 , fornece informação acerca do tamanho característico das estruturas de morros que são formados em modelos regidos por uma dinâmica difusiva, conforme consta em [55,56].



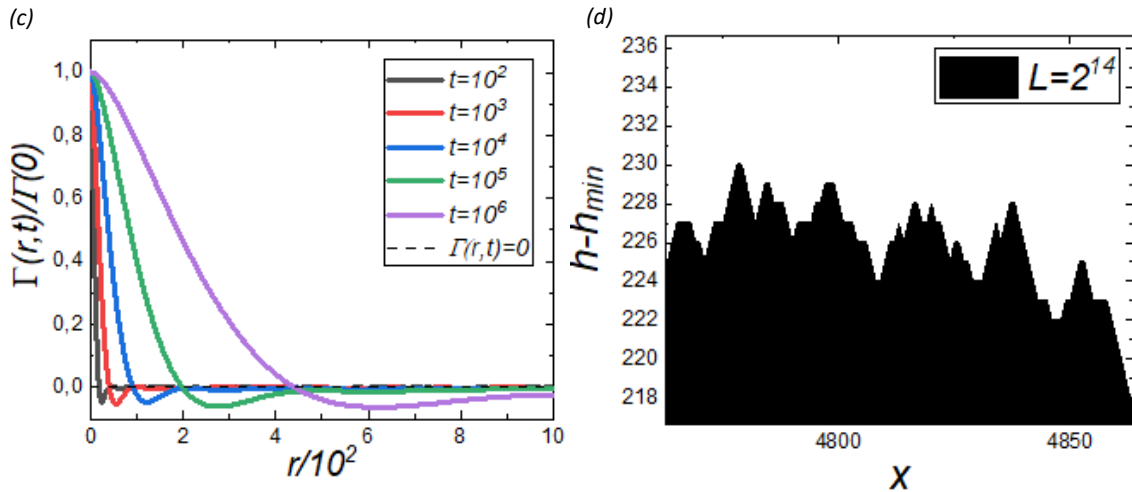


Fig.2.3: (a) Comportamento da função de auto-correlação altura-altura para um perfil rugoso do modelo de Etching em 1 + 1 dimensões, com tamanho lateral $L = 2^{19}$; (b) perfil referente ao modelo de Etching em 1 + 1 dimensões, com tamanho lateral $L = 2^{19}$; (c) função de auto-correlação altura-altura para um perfil do modelo CRSOS em 1 + 1 dimensões, com $L = 2^{14}$, com tamanho característico e presença de morros. Observa-se o comportamento oscilatório, anteriormente exposto, em torno do ponto $\Gamma(r, t) = 0$; (d) parte do perfil do modelo CRSOS em 1 + 1 dimensões com $L = 2^{14}$. Nota-se a presença de estruturas de morros diferente do observado na letra (b).

2.5 Modelo de deposição aleatória

Após abordar alguns conceitos relacionados a escala, como expoentes de escala e relação de escala FV, é possível iniciar uma discussão sobre os modelos discretos que serão abordados nesta dissertação. O modelo de deposição mais simples possível é o da deposição aleatória [11]. A equação de movimento que rege a dinâmica de crescimento da altura na interface é uma equação de Langevin e possui solução exata. A partícula é depositada aleatoriamente em uma coluna sem obedecer qualquer restrição ou condição, ela é livre para fixar-se no topo de qualquer coluna. Portanto, não há vínculos ou correlações entre as alturas das colunas vizinhas e não se observará a saturação, vide Fig.2.4. Uma vez que não há comprimento de correlação paralelo à superfície, não será possível a determinação do expoente de rugosidade global (que é calculado através da região de saturação), ou expoente dinâmico. É proposta uma equação diferencial estocástica que consiga descrever a evolução temporal da interface:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = F + \eta(x, t), \quad (2.17)$$

onde F representa o fluxo médio de partículas que chegam em um determinado sítio da rede, e $\eta(x, t)$ é o ruído responsável por introduzir o caráter aleatório das

flutuações de altura na superfície e possui as mesmas características do ruído discutidas na seção 2.1. Estas propriedades decorrem do fato de não haver correlação temporal e espacial sobre o ruído, logo:

$$\langle \eta(x, t) \rangle = 0 , \quad (2.18)$$

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = 2D \delta^d(x - x') \delta(t - t') , \quad (2.19)$$

onde d é a dimensão do substrato, D representa a amplitude das flutuações da interface. O fluxo de partículas depositadas é constante, o que torna a equação (2.17) de fácil resolução. Usando as propriedades do ruído, pode-se calcular a altura média integrando a equação (2.17), ou seja :

$$h(x, t) = Ft + \int_0^t \eta(x, t') dt' , \quad (2.20)$$

tomando a média da expressão acima e utilizando (2.31), é encontrado que:

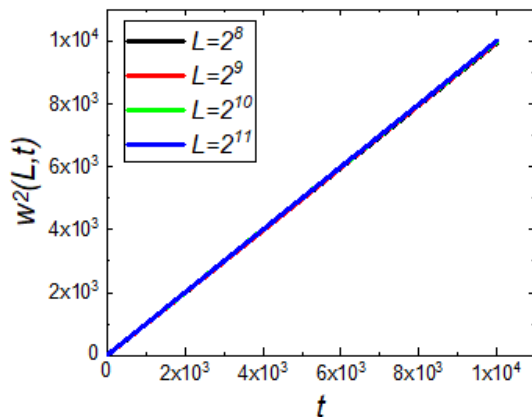
$$\langle h(x, t) \rangle = Ft , \quad (2.21)$$

o valor médio da altura da interface cresce linearmente com o tempo. Utilizando (2.19 – 21) é possível calcular a rugosidade quadrática global:

$$\begin{aligned} \langle h^2(x, t) \rangle &= (Ft)^2 + 2Dt , \\ w^2(t) &= \langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 = 2Dt . \end{aligned} \quad (2.22)$$

Conforme exposto na Fig.2.4, a rugosidade global cresce como potência do tempo, $w(L, t) \sim t^\beta$. Comparando estes resultados, encontra-se que o expoente de crescimento é $\beta = 1/2$, que caracteriza um processo de crescimento descorrelacionado das alturas na interface.

(a)



(b)

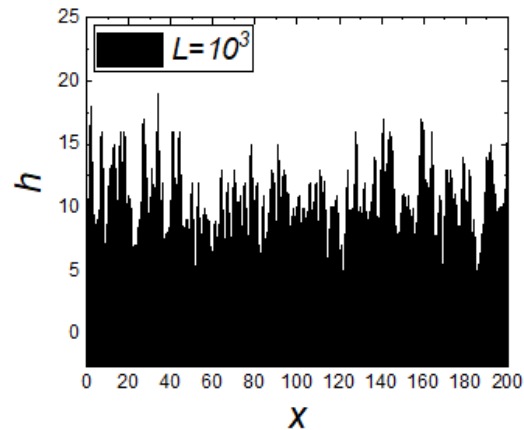


Fig.2.4: (a) Ilustração da evolução da rugosidade quadrática global para o modelo da deposição aleatória, com tamanho lateral $L = 10^3$ e $t = 10^4$. Percebe-se que de fato não existe regime de saturação e a rugosidade cresce com o tempo; (b) representação do perfil para o referido modelo.

2.6 A classe Edwards-Wilkinson (EW)

A classe de universalidade regida pela equação diferencial estocástica de Edwards e Wilkinson, foi inicialmente proposta para descrever o enrugamento de uma interface em modelos de agregado granular [18]. Os princípios físicos revelam as características implícitas e a naturezas das correlações que se propagam através da superfície, seja na forma de agregação ou difusão das partículas recém-chegadas na interface. Além disto é necessário compreender quais as simetrias envolvidas na equação de crescimento EW. Deve-se considerar na equação de crescimento uma combinação de termos envolvendo derivadas locais, $\nabla h, \nabla^2 h, \nabla^3 h, \dots, \nabla^n h, (\nabla h)^2, (\nabla^2 h)^2, \dots, (\nabla^n h)^2, \dots, \nabla(\nabla h)^2, \dots$. Em seguida é necessário analisar quais destes termos “sobrevivem” após obedecer aos princípios de simetria.

A primeira simetria a ser obedecida é a invariância sob translação no tempo, logo a equação deve ser invariante sob transformação $t \rightarrow t + \delta_t$. Além disto, a equação tem de ser invariante sob translação na direção de crescimento. Em outras palavras o crescimento da interface deve independe de onde é fixada a origem da altura, o que conduz a uma invariância na equação de crescimento mediante uma transformação do tipo $h \rightarrow h + \delta_h$. A partir dessa última condição, percebe-se que termos envolvendo $\nabla h, \nabla^2 h, \dots, \nabla^n h$ satisfazem aquela simetria e são candidatos a compor a equação de crescimento. Também deve existir uma simetria relacionada a invariância translacional na direção perpendicular ao crescimento da altura, implicando na independência da equação no valor de x sob uma transformação do tipo $x \rightarrow x + \delta_x$. O gradiente da altura, ∇h , satisfaz essa simetria, bem como termos relacionados a forma $\partial^n / \partial x^n$ para $n > 0$. Há também um princípio de simetria relacionado a rotação e inversão na direção normal \hat{n} ao crescimento, que não é obedecida por termos como $\nabla h, \nabla(\nabla h)^2$, pois ao se considerar uma transformação $x \rightarrow -x$, o termo $\partial h / \partial x$ muda de sinal, quebrando a simetria de inversão por rotação. Contudo, termos elevados a potências pares do gradiente da altura sobrevivem a essa simetria, tais como $(\nabla h)^2$, assim como o laplaciano $\nabla^2 h$. A última das simetrias a ser analisada é a “up/down”, que está conectada ao fato de que as flutuações de altura na interface devem ser similares em relação à altura média, diante de uma simetria $h \rightarrow -h$. O termo não linear $(\nabla h)^2$ não satisfaz essa simetria, portanto, não compõe a equação de crescimento. A simetria “up/down”, está intimamente ligada ao aspecto de equilíbrio encontrado em superfícies pertencentes a classe de universalidade EW. Existe uma tensão superficial responsável por “relaxar” as alturas na interface, produzindo um padrão de rugosidade cada vez mais suave.

Esta tensão superficial é útil na descrição de modelos difusivos em sistemas fora do equilíbrio, onde há tendência ao crescimento do enrugamento, e esta simetria será naturalmente quebrada. Coadunando todas essas observações acerca das simetrias, os termos que sobram e compõe a equação de crescimento têm a forma:

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \nabla^2 h + \nabla^4 h + \dots + \nabla^{2n} h + \nabla^2 h (\nabla h)^2 + \dots + \nabla^{2k} h (\nabla h)^{2j} + \eta(x,t) \quad \forall \quad n, j, k \in \mathbb{Z}^+, \quad (2.23)$$

onde $\eta(x,t)$, é um ruído não conservativo que obedece às propriedades vistas em (2.18 – 19). As propriedades de escala por sua vez, devem ser obtidas no limite hidrodinâmico, ou seja, para tamanhos e tempos suficientemente longos ($t \rightarrow \infty, x \rightarrow \infty$). Neste limite, os termos de ordem superior se tornam desprezíveis em comparação aos laplacianos, assim, obtêm-se uma forma final para a equação linear de crescimento:

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \nu_1 \nabla^2 h + \eta(x,t), \quad (2.24)$$

onde ν_1 representa a tensão superficial que age no sentido de suavizar a interface. O laplaciano na equação (2.24) designa um mecanismo de suavização conservativo da superfície, de modo a redistribuir as irregularidades presentes na superfície, por este motivo, a altura média das colunas permanece inalterada e a velocidade média da interface é nula.

Através de argumentos de escalas é possível obter os expoentes de escala para a classe de universalidade EW. Aplica-se uma transformação de escala, o que equivale a reescalar por um fator b , de modo que na horizontal resultará em $x \rightarrow x' \equiv bx$, e na vertical $h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h$. Como a rugosidade evolui no tempo, haverá diferentes rugosidades para diferentes intervalos de tempo, então o tempo também deve ser reescalado sob a forma $t \rightarrow t' \equiv b^z t$. Aplicando estas transformações na equação EW, resulta:

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \nu_1 b^{z-2} \nabla^2 h + b^{-d/2+z+z/2-\alpha} \eta. \quad (2.25)$$

Tendo em vista que a interface é um fractal auto-afim, ela deve ser estatisticamente indistinguível da original mediante transformação anisotrópica de escala. Isto implica que a nova equação gerada através da reescala deve ser independente do fator b , e com isto, será encontrado o valor dos expoentes de escala, dados por:

$$\alpha = \frac{2-d}{2}; \quad \beta = \frac{2-d}{4}; \quad z = \frac{\alpha}{\beta} = 2. \quad (2.26)$$

Na equação anterior, para o caso $d = 2$, existe uma dimensão crítica onde as leis de potência perdem sua validade. Neste regime os expoentes de escala não escalam seguindo uma lei de potência, mas sim de maneira logarítmica. A rugosidade nos instantes iniciais cresce com o logaritmo do tempo e também irá atingir o regime de saturação com o logaritmo do tamanho do sistema [10]. Como

consequência da rugosidade escalar de maneira logarítmica, acima da dimensão crítica superior, $d_c = 2$, as flutuações de altura na interface geradas pelo ruído η serão suavizadas pela ação da tensão superficial, eliminando gradativamente o enrugamento cinético, gerando superfícies cada vez mais suaves.

2.6.1 Modelo de Family

O modelo da deposição aleatória com relaxação, ou também conhecido como modelo de Family [58], descreve uma partícula recém-chegada a uma interface que não permanece irreversivelmente sob a coluna em que foi depositada, mas que se difundirá, deslocando-se sobre a interface até alcançar o sítio vizinho que possui menor altura. A partícula recém-chegada é dotada da capacidade de comparar as colunas vizinhas e permanece naquela que possuir menor altura. Como resultado a interface descrita por esse modelo será suave, quando comparada com outros modelos que não possuem este mecanismo de “suavização”. Este modelo é especialmente útil na análise de processos que ocorrem deposição de vapor e de sedimentação. O mecanismo de difusão na superfície é similar a tensão superficial de um líquido [59], para mais resultados sobre esta classe de universalidade consultar [60]. Na *Fig.2.5*, é possível perceber como funciona esse mecanismo sobre a superfície, de fato, este é o modelo mais conhecido da classe *EW*.

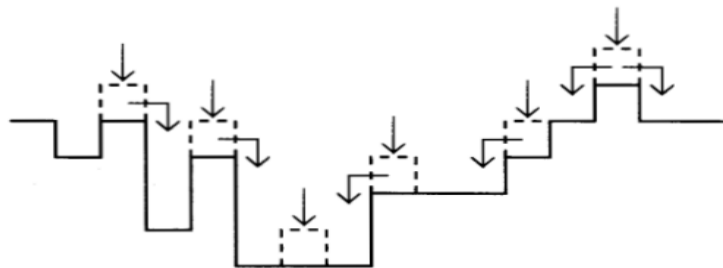


Fig.2.5: Esquema de uma partícula recém-chegada que sofre processo de difusão até permanecer na coluna vizinha com menor altura. Representação do modelo discreto de Family, retirado de [11].

Resultados reportados em [58], confirmam a classe de universalidade deste modelo discreto como sendo *EW*. Na *Fig.2.6*, apresentam-se dados de simulações computacionais para o conjunto de expoentes de escala que também corroboram estes resultados.

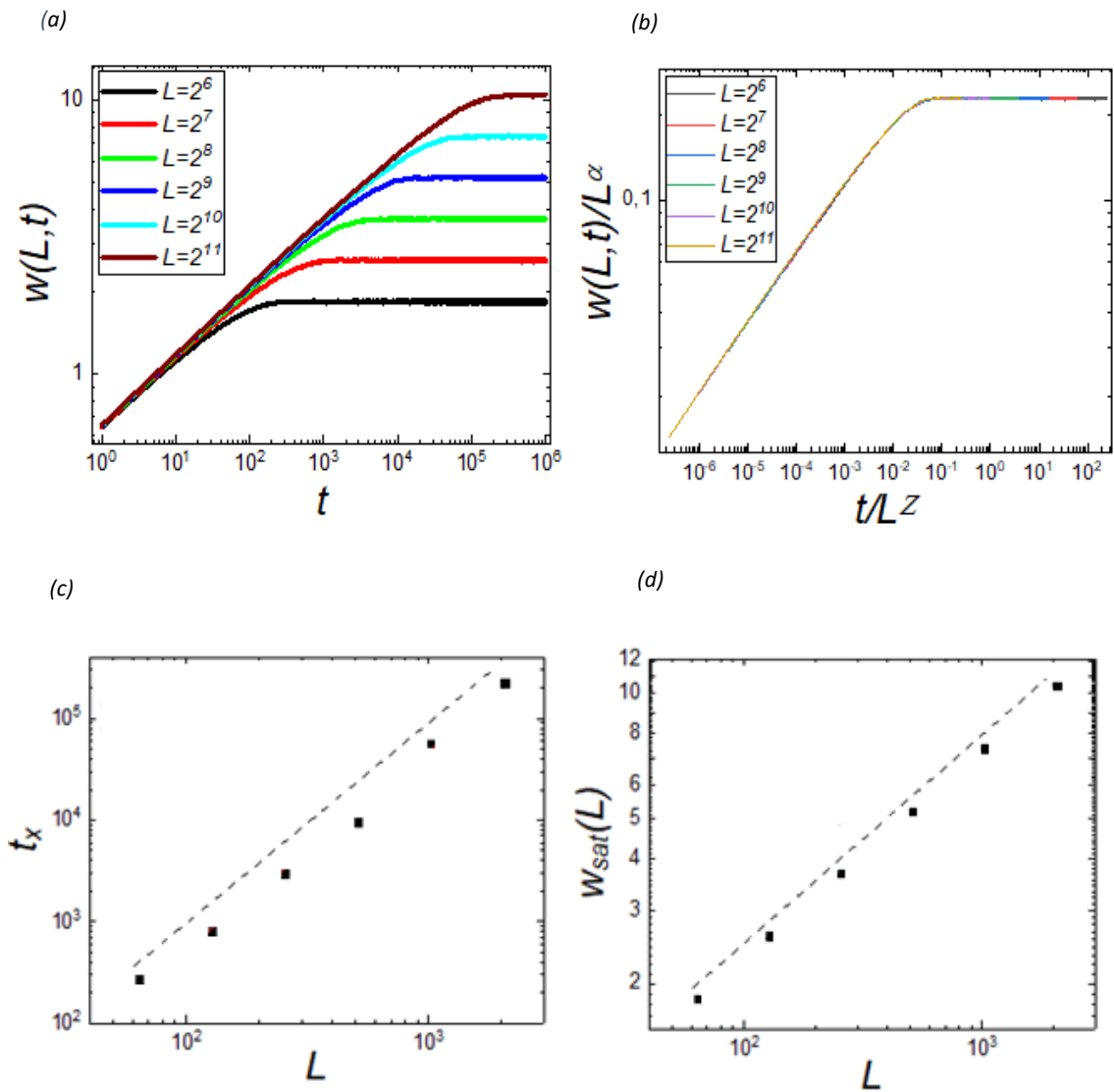


Fig.2.6: (a) curvas de rugosidade global, $w(L, t)$, em função do tempo para diferentes tamanhos referente ao modelo de Family com 10^5 monocamadas; (b) colapso das curvas de rugosidade global seguindo a relação de escala de FV; (c) gráfico do tempo de crossover em função do tamanho lateral do sistema. (d) gráfico da rugosidade no regime de saturação em função do tamanho lateral do sistema. As linhas tracejadas representam os expoentes esperados para a classe EW.

2.7 A classe Kardar-Parisi-Zhang (KPZ)

A classe de universalidade regida pela equação diferencial estocástica KPZ¹ de Kardar, Parisi e Zhang [17], é outra equação proposta para descrever a evolução temporal de uma interface. Foi proposta inicialmente para problemas envolvendo polímeros direcionados aleatoriamente. Contudo, atualmente a equação KPZ fornece uma descrição para a cinética de uma série de sistemas com crescente interesse científico, nas mais diversas áreas do conhecimento [61]. Através da equação KPZ é possível obter informações a respeito da escala e distribuição de flutuações da interface de diferentes tipos de polímeros [62,63], bem como na análise da escala em flutuações locais de filmes policristalinos [64,65]. É também utilizada na descrição da dinâmica de propagação frontal que ocorre na oxidação catalítica do CO [66].

Diante da presença de distintas correlações em outros modelos de rede, surge a necessidade de se estender a equação EW adicionando termos não lineares, mas ao fazê-lo as previsões do modelo linear falham. Neste sentido, foi realizada uma generalização da equação EW para abranger termos não lineares que explicassem, por exemplo, além das propriedades de escala, outras características presentes na deposição de outros sistemas. A equação KPZ é construída levando em conta princípios físicos e princípios de simetria, os mesmos discutidos anteriormente para a classe EW. Contudo, modelos pertencentes a classe KPZ exibem um fenômeno de crescimento lateral. Em razão disto, não é obedecida a simetria que surge diante de uma transformação $h \rightarrow -h$, portanto, o termo não linear $(\nabla h)^2$, que satisfaz essa simetria, deve ser levado em consideração na equação de crescimento do perfil, que tem a forma:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = v_1 \nabla^2 h + \frac{\lambda_1}{2} (\nabla h)^2 + \eta(x, t) , \quad (2.27)$$

onde v_1 é a tensão superficial advinda da equação EW, e η é o ruído gaussiano. Um olhar mais atento à equação KPZ sugere algumas semelhanças com a EW [11], que de fato existem, mas com algumas restrições. A primeira delas faz menção a quebra de simetria na direção “para cima e para baixo”, que pode ser atribuída ao crescimento lateral que o sistema apresenta. Outra característica é a existência de um excesso de velocidade proveniente da presença de uma força perpendicular, F , que orienta a direção do crescimento na interface. O termo λ_1 faz menção a capacidade da interface aumentar sua altura se $(\nabla h)^2$ for positivo, devido à adição de matéria recém chegada via processo de deposição, ou perda de matéria, se λ_1 for negativo. Outra distinção entre as equações que descrevem as classes de universalidade é que a EW não possui um termo responsável pela velocidade da interface, devido ao processo de suavização, (*i.e.*, redistribuição

¹ Em 2011, houve a primeira bem sucedida resolução da equação KPZ considerando a condição inicial do substrato ser plano, para uma discussão mais aprofundada consultar [132].

de irregularidades), que resulta em uma variação temporal nula das alturas médias. Vale ressaltar que o termo que representa o fluxo de partículas à interface foi omitido na representação das equações de crescimento (2.24 – 27). Já na equação *KPZ* isso se verifica apenas no caso de a superfície ser plana. Pode-se inferir que a presença do termo não linear é responsável pela adição de matéria em excesso ao fluxo de deposição (omitido na equação 2.27), como consequência direta gera um excesso de velocidade na interface.

Não é possível a utilização de argumentos de escala, semelhantes aos realizados para a equação *EW*, para encontrar o conjunto de expoentes que caracterizam a escala da classe de universalidade *KPZ*. O tratamento adequado para obtenção dos expoentes de escala da classe *KPZ*, no caso 1 + 1 dimensões, é realizado através da teoria de renormalização de grupo. Os expoentes de escala reportados são:

$$\alpha = 1/2 \quad ; \quad \beta = 1/3 \quad ; \quad z = 3/2 . \quad (2.28)$$

Contudo, em dimensões superiores, a teoria de renormalização revelou-se falha para obtenção dos expoentes de escala. Para o caso 2 + 1 dimensões, trabalhos utilizando simulações computacionais reportam $\alpha = 0,3869(4)$, $\beta = 0,24151(5)$ e $z = 1,6131(4)$ [31,67]. Um trabalho envolvendo quantização de escala em superfícies crescidas [68] sugere um valor analítico para os expoentes de escala, com $\alpha = 2/5$ e $z = 8/5$.

2.7.1 O modelo Deposição Balística (DB)

Um dos modelos mais estudados dessa classe de universalidade é da deposição balística (DB), introduzido inicialmente de maneira independente por Vold [69] e Sutherland [70]. A priori, foi desenvolvido para explicar as estruturas que se formavam através de agregados coloidais [25]. O referido modelo pode reproduzir o processo de deposição de vapor, que constitui uma técnica utilizada na manufatura de dispositivos óticos e eletrônicos [71]. Inicialmente partículas são depositadas verticalmente de maneira aleatória sob um substrato plano e se agregam no primeiro contato com o topo de cada coluna, produzindo um padrão rugoso bastante peculiar formado de aglomerados porosos e com espaços vazios. Em decorrência disto o sistema passa a experimentar um crescimento lateral [11].

O modelo discreto em rede quadrada é construído de maneira simples. Em um instante inicial $t = 0$, tem-se que o substrato é plano $h(i, t) = 0$, em seguida um novo sitio é sorteado obedecendo a relação $h(i, t + 1) = \max[h(i - 1, t), h(i, t) + 1, h(i + 1, t)]$. Trabalhos reportam que este modelo pertence à classe de universalidade *KPZ*, e sua equivalência com a classe é elucidada. Todavia, recentes trabalhos indicam a existência de fortes correções de escala para o modelo, reforçando a necessidade de implementação de

métodos para correção de escala. Na *Fib. 2.7(a)*, observa-se no gráfico da rugosidade global em função do tempo, que nos instantes iniciais exibe uma região de *crossover*. Este comportamento ocorre em razão do crescimento decorrelacionado durante os instantes iniciais, que conduz a um crescimento compatível com o observado no processo de deposição aleatória. Após esse crossover, retorna-se ao expoente de crescimento esperado para a classe. A *Fib. 2.7(b)* mostra o colapso das curvas de rugosidade seguindo a relação de escala de FV. As *Fib. 2.7(c – d)* exibem uma comparação entre os expoentes efetivos obtidos a partir de simulações numéricas e os esperados para a classe de universalidade da equação KPZ.

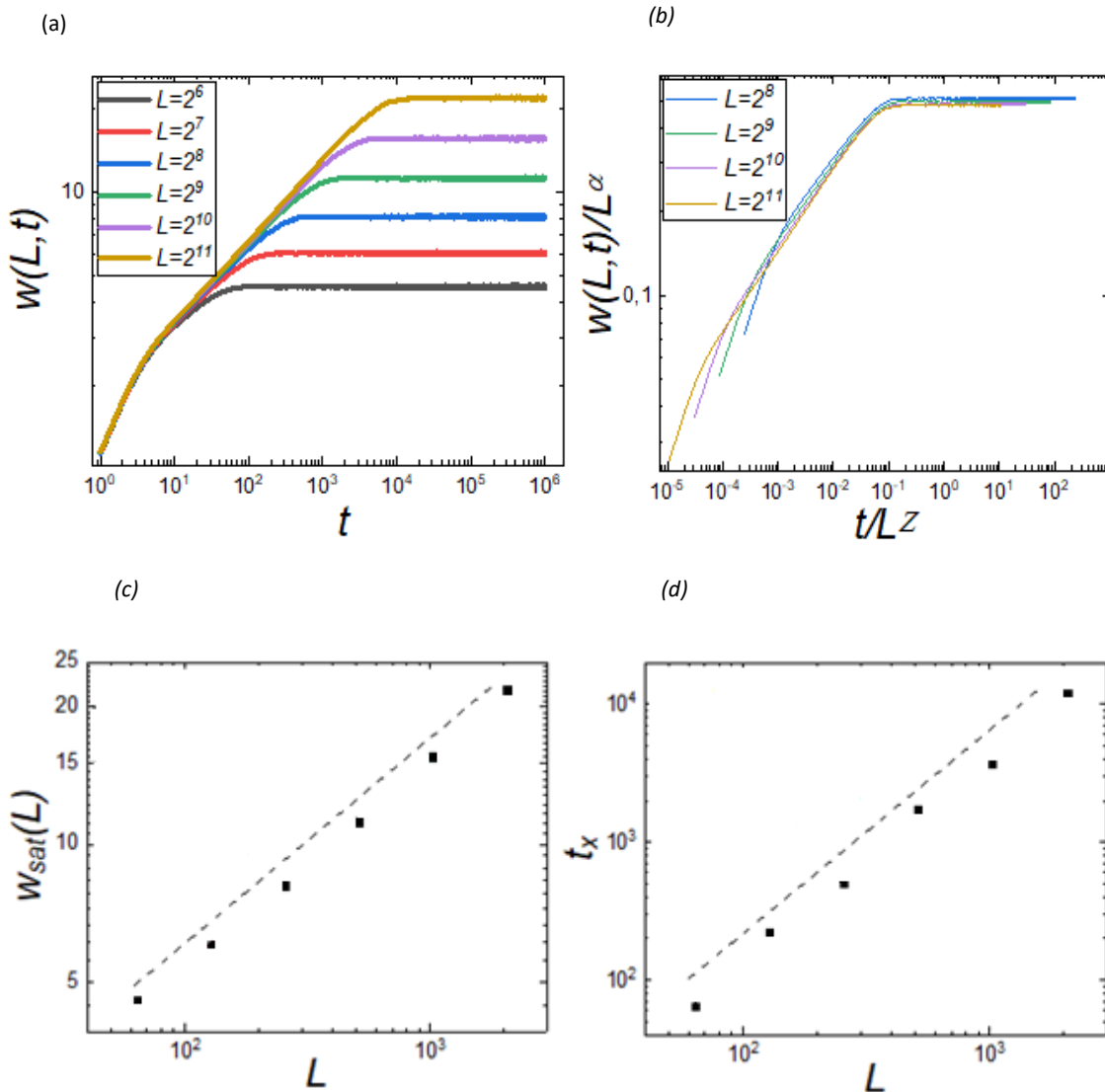


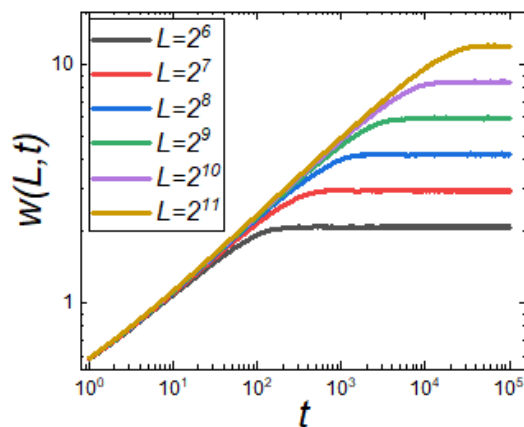
Fig.2.7: (a) Curvas de rugosidade global em função do tempo para o modelo DB em 1 + 1 dimensões, na escala logarítmica, para o tempo $t = 10^6$. (b) Colapso das curvas da rugosidade global usando a relação de escala de FV. (c) Gráfico da rugosidade no regime de saturação em função do tamanho lateral do sistema. (d) Gráfico do tempo de crossover em função do tamanho lateral do sistema. As linhas tracejadas representam os expoentes esperados para a classe KPZ.

2.7.2 O modelo de Etching

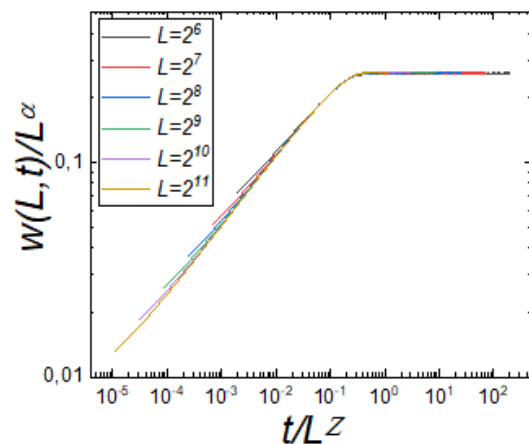
O modelo de Etching foi inicialmente proposto em [34]. Possui inúmeras aplicações, a exemplo da descrição de diferentes fenômenos envolvendo dissolução de um composto sólido em um meio líquido, bem como a erosão sofrida por uma superfície devido a ação direta de um ácido. A premissa em que o modelo se sustenta é que a variação de probabilidade em um determinado intervalo de tempo de uma partícula ser expulsa da superfície é diretamente proporcional a área exposta ao fluxo de partículas. O modelo consiste em um substrato quadrado que sofrerá dissolução devido ação do fluxo de partículas do solvente na superfície de contato.

A dinâmica de crescimento da superfície no modelo de Etching pode ser representado pelos seguintes passos [35,49]: em um instante arbitrário uma partícula recém chegada é depositada em uma coluna aleatória, caso $h_{i+1}(t) < h_i(t)$, conduz a $h_{i+1}(t+1) = h_i(t)$, mas se $h_{i-1}(t) < h_i(t)$, leva a $h_{i-1}(t+1) = h_i(t)$, e finalmente, $h_i(t+1) = h_i(t) + 1$. O crescimento da superfície para este modelo é bem descrito pela equação estocástica KPZ, sendo assim, os expoentes de escala são compatíveis com à classe de universalidade KPZ. Na Fig.2.8(a – b), apresentam-se dados de simulações computacionais para a evolução da rugosidade global e para o colapso de curvas através da relação de escala FV, respectivamente. As Fig.2.8(c – d) exibem uma comparação entre os expoentes efetivos obtidos a partir de simulações numéricas e os esperados para a classe de universalidade da equação KPZ. As Fig.2.9(a – b) ilustram os modelo de rede de Etching e DB.

(a)



(b)



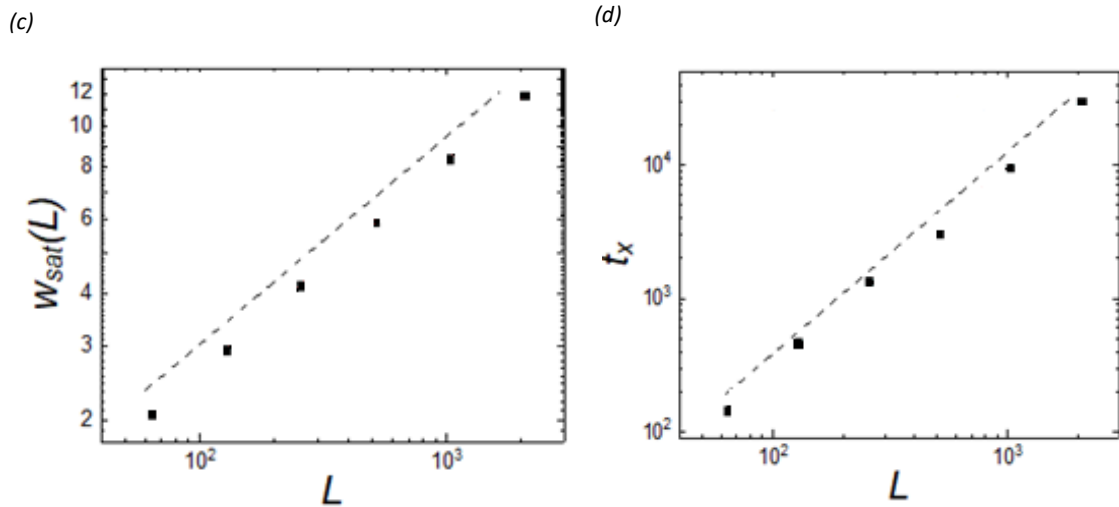


Fig.2.8: (a) Curvas de rugosidade global em função do tempo para o modelo de Etching em 1 + 1 dimensões, na escala logarítmica, para o tempo de 10^6 . (b) Colapso das curvas da rugosidade global usando a relação de escala de FV. (c) Gráfico da rugosidade no regime de saturação em função do tamanho lateral do sistema. (d) Gráfico do tempo de crossover em função do tamanho lateral. Por último, todos os resultados acima expostos foram obtidos com 10^3 realizações independentes, estando em acordo com o esperado para a classe KPZ. As linhas tracejadas representam os expoentes esperados para a classe KPZ.

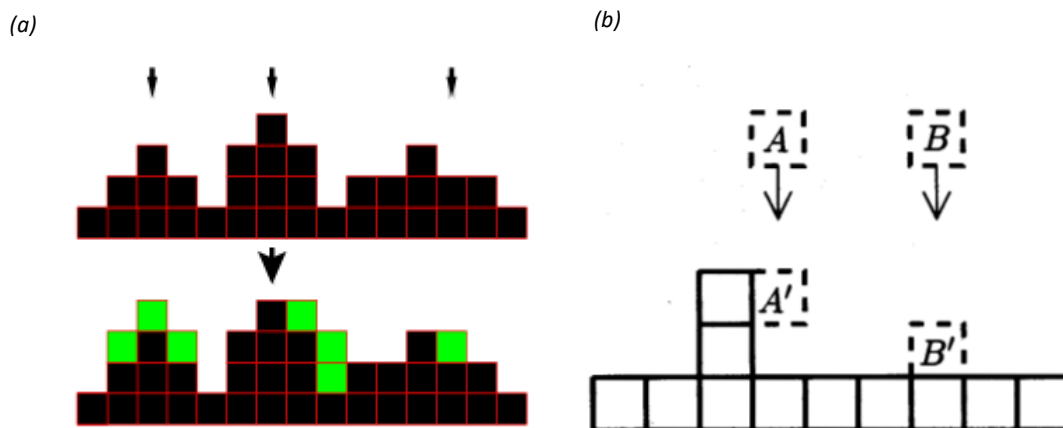


Fig.2.9: (a) Esquematização do modelo de Etching unidimensional na versão original. As setas indicam as colunas escolhidas aleatoriamente e os blocos pretos as partículas previamente depositadas, os blocos verdes indicam as partículas recém-chegadas. Ilustração retirada de [49]. (b) processo de agregação de partículas recém chegadas no modelo DB em 1 + 1 dimensões. Ilustração retirada de [11].

2.8 A classe Villain, Lai e Das Sarma (VLDS)

Após tratar a equação *EW* e *KPZ*, pode-se imaginar casos em que essas duas equações estocásticas de crescimento não sejam capazes de descrever o fenômeno de enrugamento cinético, como observado em fenômenos onde a difusão superficial é o mecanismo microscópico dominante. Há um interesse da indústria em produzir filmes de alta qualidade e cada vez mais finos, sem impurezas e irregularidades. Para tal, é crescente a utilização da técnica de epitaxia por feixe molecular (*Molecular Beam Epitaxy-MBE*). Uma equação estocástica que pode descrever o crescimento de filmes finos utilizando este método é a chamada equação *VLDS*, foi descrita inicialmente por Villain [20] e por Lai e Das Sarma [19], de maneira independente e possui a forma:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \lambda_4 \nabla^2 (\nabla h)^2 - \nu_4 \nabla^4 h + \eta(x, t), \quad (2.29)$$

onde $\eta(x, t)$ é um ruído gaussiano não conservativo com as mesmas propriedades já discutidas, λ_4 e ν_4 são coeficientes macroscópicos determinados através das condições de crescimento [54]. O termo $\nabla^4 h$ está diretamente relacionado a uma corrente conservativa em direção aos mínimos do potencial químico, conforme justificado em [72]. O termo $\nabla^2 (\nabla h)^2$ refere-se à propriedade da partícula que se difunde pela superfície de passar por uma barreira de difusão simétrica e não possuir direção preferencial, ou fazer distinção na subida ou descida de degraus. Conforme discorrido, esta equação estocástica descreve o processo de fabricação de filmes finos usando a técnica *MBE*, onde partículas depositadas se difundem sob um substrato a altas temperaturas, da ordem de 500 – 1000 K, existindo uma competição entre deposição e difusão. Por esse motivo, a classe de universalidade abrangida pela equação *VLDS* é também conhecida na literatura como *MBE* não linear. Ademais, outras aplicações e considerações importantes sobre o método podem ser encontradas em [73,74].

O conjunto de expoentes que caracterizam a escala para à classe *VLDS*, que podem ser obtidos através do método dinâmico de renormalização de grupo, como se segue:

$$\alpha = \frac{4-d}{3} \quad ; \quad \beta = \frac{4-d}{8+d} \quad ; \quad z = \frac{8+d}{3} . \quad (2.30)$$

Percebe-se que a dimensão crítica superior é $d_c = 4$, contudo, esta dimensão foge do escopo de aplicação para a deposição de filmes finos, que ocorre no caso 2 + 1 dimensões. Resultados presentes em [75], reportam a existência de correções de ordem superior que foram analisadas usando renormalização de segundo laço e modificam os expoentes de escala (2.30), que passam a ser:

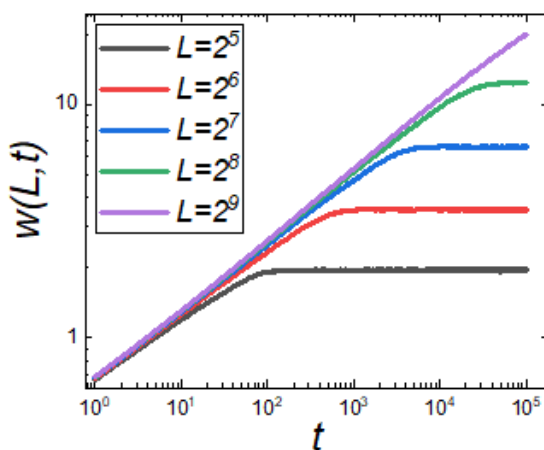
$$\alpha = \frac{4-d}{3} - \delta \quad ; \quad \beta = \frac{4-d-3\delta}{8+d-6\delta} \quad ; \quad z = \frac{8+d}{3} - 2\delta , \quad (2.31)$$

onde $\delta = 0.01361 \left(\frac{d_c - d}{2}\right)^2$, d a dimensão do substrato, e d_c a dimensão crítica.

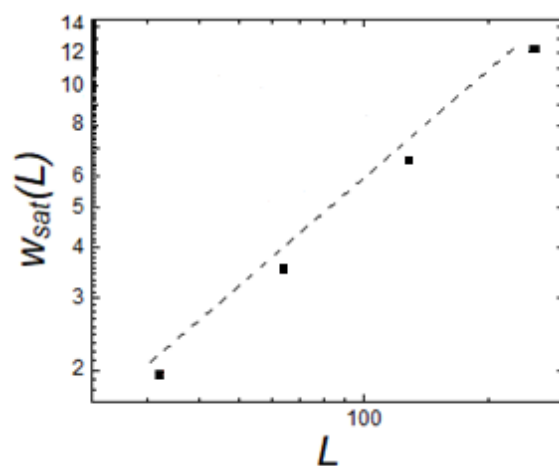
2.8.1 O modelo CRSOS

O modelo sólido sobre sólido conservativo (*Conserved Growth in a Restricted Solid-on-Solid model-CRSOS*) ou *conserved RSOS*, é um modelo discreto pertencente à classe VLDS [76]. Surge devido a uma ligeira modificação no modelo *RSOS* (*Restricted Solid-on-Solid*), sendo que agora as partículas depositadas são conservadas [77,78]. Este modelo parte de uma restrição imposta no processo de deposição onde é permitido apenas a deposição de um sólido sobre outro sólido. Para construir o modelo é preciso definir uma constante m , que corresponde a uma diferença de altura, $|\Delta h_{i,j}|$, que as colunas nos sítios vizinhos da rede podem alcançar, portanto, têm-se necessariamente que obedecer a condição $|\Delta h_{i,j}| \leq m$ [10,49]. Neste trabalho utilizou-se para as simulações $m = 1$. O processo de deposição no modelo *CRSOS* ocorre se a diferença de altura máxima entre duas colunas vizinhas for menor ou igual a m , caso contrário, a partícula irá realizar uma caminhada aleatória sobre a interface até alcançar um novo sítio onde a restrição é satisfeita e irá agregar-se. É neste sentido que o modelo é conservativo, ao contrário de seu modelo originário em que a partícula seria descartada caso não respeitasse a condição. Na *Fig. 2.10(a - b)*, apresentam-se simulações computacionais para a evolução da rugosidade global e o colapso da rugosidade global utilizando a relação de escala de FV, respectivamente. As *Fib. 2.10(c - d)* exibem uma comparação entre os expoentes efetivos α e β obtidos a partir de simulações numéricas e os esperados para a classe de universalidade da equação VLDS.

(a)



(b)



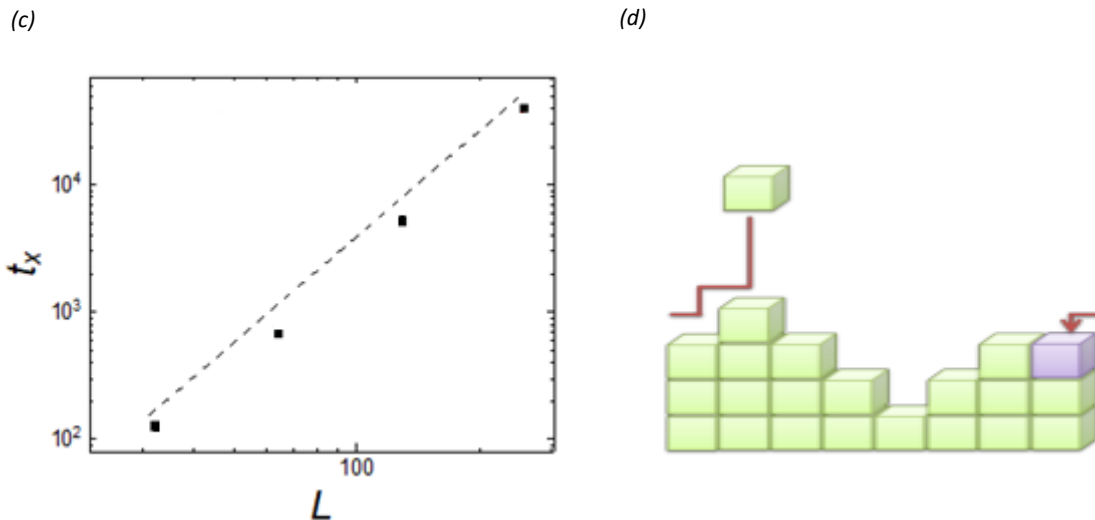


Fig.2.10: (a) curvas de rugosidade global em função do tempo, na escala logarítmica, para o modelo CRSOS em 1 + 1 dimensões, para o tempo de 10^5 . (b) gráfico da rugosidade no regime de saturação. (c) gráfico do tempo de crossover em função do tamanho lateral. As linhas tracejadas representam os expoentes esperados para a classe VLDS. (d) Representação do processo de deposição no modelo de rede CRSOS com condições periódicas de contorno, onde após satisfeita a condição $|\Delta h_{i,j}| \leq m$, a partícula se agrega, caso contrário, se difundi ao sítio em que a condição é obedecida. Ilustração retirada de [10].

2.9 Método de correção para os expoentes de escala

Até cerca de 20 anos atrás, vários trabalhos reportaram discrepâncias entre os expoentes de escala obtidos através de simulações computacionais para o modelo da deposição balística e os expoentes esperados para a equação *KPZ* [48,25,79,80], colocando em dúvida a equivalência do modelo com à classe de universalidade *KPZ*. Os expoentes de escala são bem definidos no limite hidrodinâmico, isto implica em $L \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$. Contudo, esses limites são inviáveis em simulações numéricas, abrindo precedentes para a existência de efeitos de tamanho e tempo finito que acabam por impactar na obtenção dos expoentes que caracterizam a escala. Tal fato evidencia a necessidade de implementação de um método para a correção dos expoentes. O modelo da deposição balística possui fortes correções de escala que emergem em partes do efeito de tamanho finito. Diante disto, será utilizado o método da extrapolação, inicialmente proposto em [30], para obtenção de correções dos expoentes de escala nos modelos da deposição balística e de Family.

A primeira etapa consiste na realização de estimativas de tamanho finito para ambos expoentes. A rugosidade de saturação deve ser calculada na região que o sistema atinge o regime de saturação, e depreende um platô ou região estacionária bem definida. Enquanto que o expoente de crescimento efetivo, β_L , deve ser calculado na região de crescimento. Obtidos os expoentes efetivos, a próxima etapa consiste na realização de uma extrapolação destes expoentes (*i.e.*, tomar $L \rightarrow \infty$). Em seguida, através da regressão linear, encontram-se as estimativas assintóticas dos expoentes de escala.

Em suma o método supracitado consiste na obtenção dos expoentes de escala através de uma estimativa assintótica, gerada por meio de uma extrapolação dos expoentes efetivos. Em primeiro lugar calculou-se os expoentes efetivos de crescimento β_L , para os modelos DB e Family, com diferentes tamanhos laterais, no intervalo $2^6 \leq L \leq 2^{11}$, no tempo $t = 10^6$, com 10^4 realizações independentes, na região de crescimento compatível com um coeficiente de correlação mínimo de $r_{min} = 0,999$. Ressalta-se que a forma de obtenção dos expoentes β_L nesta dissertação foi diferente da utilizada na referência [30]. Contudo, conforme será exposto, os resultados para a extrapolação deste expoente se mostraram semelhantes. Na tabela 1 observam-se os valores obtidos para o expoente β_L :

TABELA 1: Expoentes efetivos de crescimento obtidos na região equivalente a um $r_{min} = 0,999$ em 1 + 1 dimensões, para os diferentes modelos analisados.

L	β_L , modelo DB	β_L , modelo Family
128	0,2472(5)	0,2258(4)
256	0,2604(9)	0,2401(9)
512	0,2732(5)	0,2450(9)
1024	0,2823(3)	0,2501(3)
2048	0,289(9)	0,2527(7)

Analisando a tabela 1, percebe-se que existe uma variação dos valores de β_L com respeito ao tamanho do sistema, tal constatação evidencia a necessidade de um processo de extrapolação, afim de se obter o valor assintótico de β . Dito isto, em [30] propõe-se uma forma para o *scaling* de β_L :

$$\beta_L \approx \beta + AL^{-\varphi} \quad , \quad (2.32)$$

sendo A uma constante e φ o expoente de correção de escala.

A Fig.2.2 mostra o gráfico de β_L vs $L^{-\varphi}$, com $\varphi = 0,285$ para o modelo DB, e $\varphi = 0,86$ para o modelo de Family. Estes valores de φ fornecem o melhor ajuste linear para o conjunto de cinco pontos. A partir destes expoentes para a

correção de escala obtêm-se a estimativa assintótica, $\beta = 0,325$, para o modelo DB, e $\beta = 0,255$, para o modelo de Family, que correspondem a valores próximos dos previstos para as equações KPZ e EW, respectivamente. Ademais, existem outros valores de φ que forneceriam estimativas assintóticas para o expoente de crescimento com similar precisão numérica, mas a partir de outro conjunto de dados.

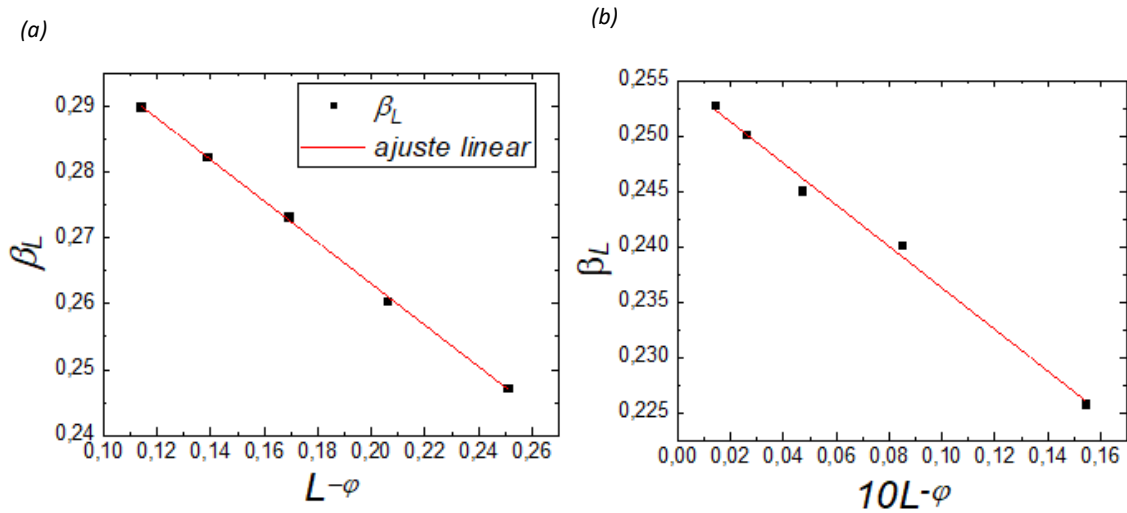


Fig.2.11: (a) Expoentes efetivos β_L em 1 + 1 dimensões, com $\varphi = 0,285$ para o modelo DB; (b) expoentes efetivos para o modelo de Family, com $\varphi = 0,86$. Os expoentes efetivos foram obtidos através do gráfico $\log W(L, t) vs \log(t)$, com 10^3 realizações independentes. Ambas aproximações assintóticas geram expoentes efetivos de escala condizentes com à classe de universalidade KPZ.

Para obtenção do expoente de rugosidade global efetivo α_L , foram realizadas médias na região estacionária da rugosidade global, em diferentes tamanhos laterais. Contudo, constatou-se como consequência do efeito de tamanho finito, que existe uma dependência destes expoentes com o tamanho do sistema. Este fato ressalta novamente a necessidade de implementação do método de correção de escala através do processo de extrapolação. O expoente efetivo α_L é calculado a partir da expressão abaixo:

$$\alpha_L = \frac{\ln[w_{sat}(L)/w_{sat}(L/2)]}{\ln 2} . \quad (2.33)$$

Na tabela 2, observa-se os valores da rugosidade no regime de saturação da interface $w_{sat}(L)$ em função de L , para distintos tamanhos, na região estacionária:

TABELA 2: valores de $w_{sat}(L)$, para diferentes tamanhos laterais obtidos na região de saturação.

L	$w_{sat}(L)$, modelo DB	$w_{sat}(L)$, modelo de Family
64	4,567(3)	1,838(4)
128	6,032(9)	2,604(8)
256	8,145(7)	3,687(6)
512	11,190(6)	5,217(5)
1024	15,555(7)	7,377(2)
2048	21,779(2)	10,434(4)

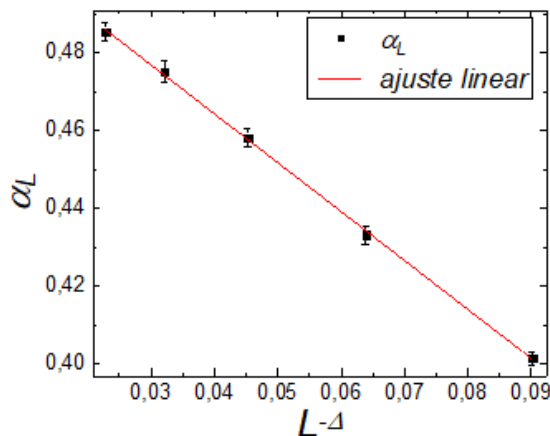
A relação proposta em [30] entre o expoente efetivo de rugosidade α_L e sua forma assintótica α , pode ser dada por:

$$\alpha_L \approx \alpha + BL^{-\Delta} \quad , \quad (2.34)$$

onde B é uma constante e Δ é um expoente para a correção de escala.

Na Fig.2.12, mostram-se gráficos de α_L vs $L^{-\Delta}$, com $\Delta = 0,496$, referente ao modelo DB, e $\Delta = 0,872$, para o modelo de Family. Estes expoentes fornecem o melhor ajuste linear para o conjunto de dados. A partir destes expoentes para a correção da escala, obtêm-se as estimativas assintóticas $\alpha = 0,519$ e $\alpha = 0,499$ para os modelos DB de Family, respectivamente. As estimativas assintóticas obtidas através do ajuste *linear* são compatíveis com os valores previstos pela equação *KPZ* e *EW*, assegurando que ambos modelos pertencem a estas classes de universalidades. Na Fig.2.12, percebe-se que o modelo DB possui fortes correções de escala quando comparado com o modelo de Family.

(a)



(b)

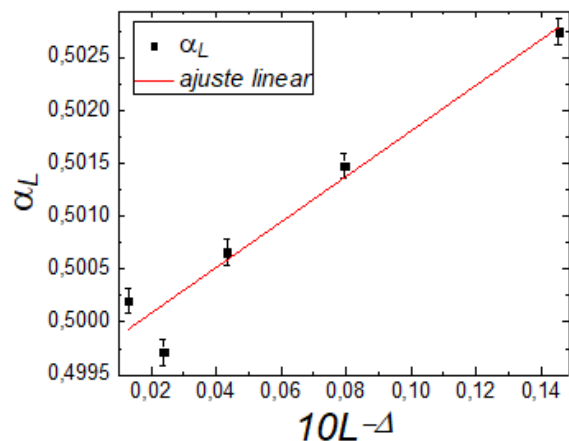


Fig.2.12: (a) expoentes efetivos de rugosidade α_L para o modelo DB em 1 + 1 dimensões, com $\Delta = 0,496$ obtido através do ajuste linear para o conjunto de cinco pontos. (b) expoentes efetivos α_L para o modelo de Family em 1 + 1 dimensões com $\Delta = 0,872$, observa-se que um dos pontos não está localizado sobre a linha reta e não fez parte do ajuste linear.

Capítulo 3:

Resultados e discussões

Neste capítulo, será apresentada uma técnica para a correção dos expoentes de escala, denominada de perfil transformado de alturas médias, ou *TMHP (Transformed mean height profile)*, que fornece o expoente de rugosidade local em concordância com a classe de universalidade KPZ. Tal método permite constatar a existência de um bin ótimo que provê a melhor correção para o expoente de rugosidade local. Ademais, a técnica THPM é capaz de preservar o expoente efetivo de crescimento global, desde que o bin utilizado seja menor que o comprimento de correlação da interface. Serão expostos resultados obtidos através de simulações computacionais que ressaltam a existência de uma conexão do TMHP com a topografia que resulta de simulação computacional que procura representar um caso específico da microscopia de força atômica, (*Atomic Force Microscopy- AFM*).

3.1 Origens da correção de escala em modelos de rede

No capítulo anterior discutiram-se os efeitos de tempo e tamanho finito [81-83], e suas implicações na obtenção dos expoentes de escala. Contudo, há outro aspecto que também é responsável por introduzir correções de escala, que se refere ao incremento das flutuações de alturas nas regiões de vales estreitos e profundos. Surge então a necessidade de considerar uma correção para a rugosidade global quadrática W^2 , que foi proposta em [32], consistindo na adição de uma constante na relação de escala de FV, que fornece:

$$W^2 \cong L^{2\alpha} f\left(\frac{t}{L^z}\right) + w_i^2 . \quad (3.1)$$

O primeiro termo do lado direito é responsável pelas flutuações observadas em grandes comprimentos de onda, enquanto que o segundo termo representa a rugosidade intrínseca [85-87], que é gerada a partir das flutuações estocásticas atribuídas aos degraus que se estendem pela superfície. Vale ressaltar que nem todos os modelos pertencentes a classe KPZ possuem uma rugosidade

intrínseca [81]. A origem da rugosidade intrínseca para o modelo DB está no caráter estocástico do crescimento das colunas. O incremento não determinístico de altura durante o processo de agregação é dado por:

$$\delta h = h(x, t + \delta t) - h(x, t) \quad . \quad (3.2)$$

As flutuações estocásticas nos vales estreitos e profundos origina grandes degraus sobre a interface, gerando uma rugosidade intrínseca que modifica a relação de escala de FV. Em razão disto, originam-se as discrepâncias na obtenção dos expoentes de escala que colocam em dúvida a equivalência de alguns modelos discretos com a classe de universalidade KPZ. Neste contexto, será introduzido a técnica do perfil transformado de alturas médias, ou TMHP.

3.2 Técnica TMHP (Transformed Mean Height Profile)

A técnica TMHP consiste na divisão da interface em diversos *bins* (compartimentos de mesmo comprimento), de modo que o perfil original é transformado a partir do cálculo das alturas médias em cada bin. A técnica TMHP consiste em uma modificação do método do bin, proposto em [84], que resulta em um perfil transformado de alturas máximas. Quando a técnica TMHP é aplicada em todos os sítios do perfil original, o perfil resultante da transformação é dito estar no regime de sobreposição. No caso em que a técnica se aplica apenas nos sítios do perfil original separados pelo tamanho do bin, o perfil gerado se encontra no regime de não sobreposição. Na Fig.3.1(a) é apresentado dois perfis gerados partir da técnica TMHP no regime de sobreposição e não sobreposição de bins. Percebe-se que no caso de sobreposição o perfil gerado possui maior semelhança com o perfil original. Observa-se que a aplicação desta técnica para os modelos discretos de Etching e DB em 1 + 1 dimensões, fornece uma correção para o *scaling*, reforçando a equivalência com classe de universalidade KPZ. Também será analisado a utilização do TMHP para o modelo CRSOS, dito pertencente à classe de universalidade VLDS. O perfil gerado pela técnica TMHP possui semelhanças com o perfil original, conforme exposto nas Fig.3.1(a-b). Além disto, verificou-se uma redução das flutuações estocásticas nos vales estreitos e profundos, diminuindo assim a presença de grandes degraus na superfície.

Ademais, constatou-se a existência de um bin ótimo, b_{opt} , que consiste no tamanho de bin que fornece a melhor correção para o expoente efetivo de rugosidade local α_{eff} . Para este tamanho de bin, observa-se no gráfico de α_{eff} uma visível região estacionário, ou platô, que não é presente para outros bins.

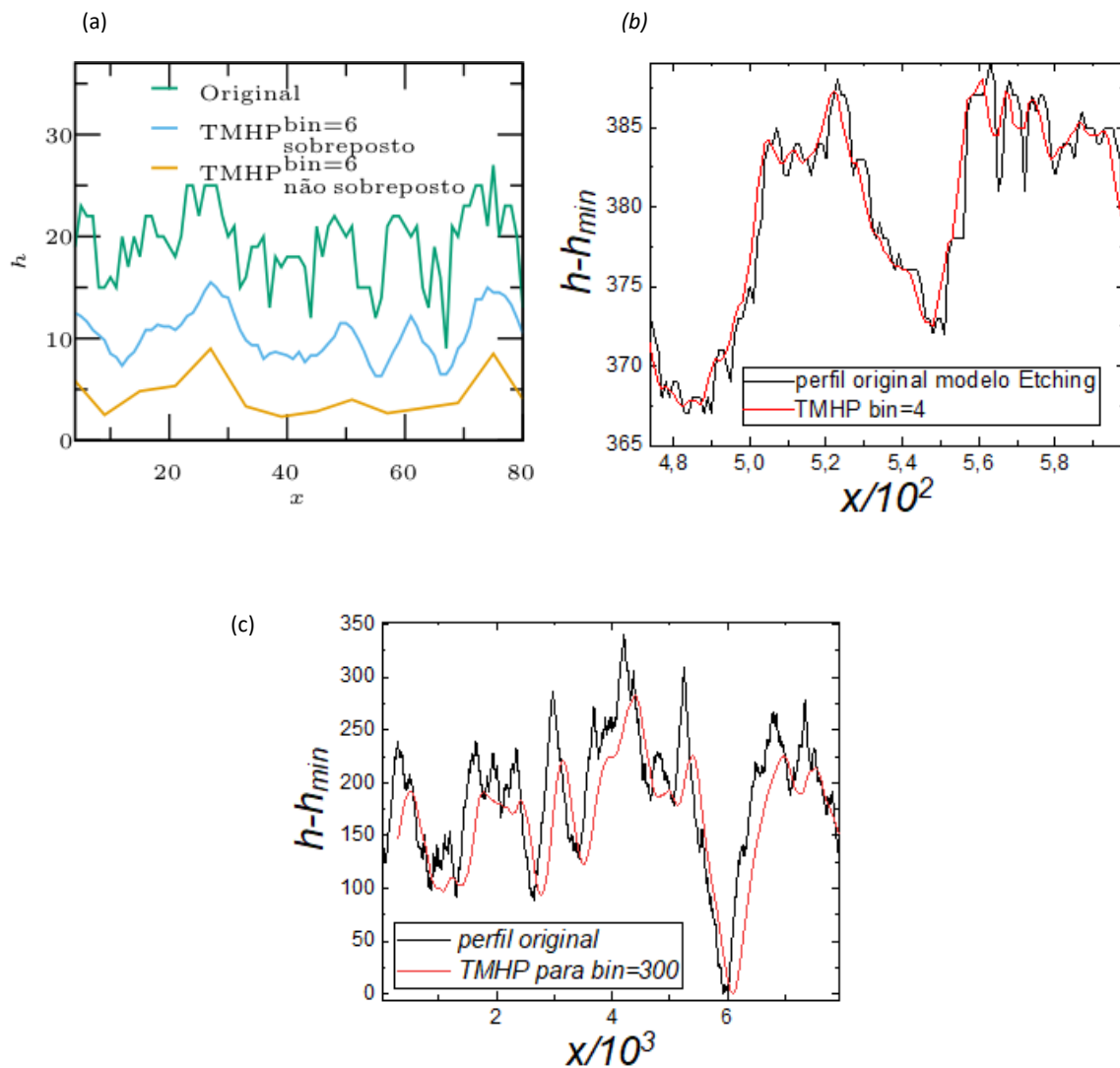


Fig.3.1: (a) Comparação da técnica TMHP com o perfil original, para os casos de bin sobreposto e não sobreposto, ilustração cedida por [122]. Comparação entre o perfil original e perfil gerado a partir do TMHP em 1 + 1 dimensões, (b) no modelo de Etching com $bin = 4$, tamanho lateral de $L = 2^{19}$ e $t = 10^6$; (c) no modelo CRSOS, com $bin = 300$, $L = 2^{14}$ e $t = 10^6$, no regime de sobreposição.

Como efeito da aplicação da técnica TMHP e do método do bin [80], observa-se uma redução nas flutuações estocásticas de altura nos vales profundos e estreitos. Portanto, o método do bin, assim como a técnica TMHP, promovem uma redução da rugosidade intrínseca que modifica a relação de escala de FV, que origina fortes correções de escala em modelos de rede pertencentes à classe KPZ.

Conforme exibido na Fig.3.2(a-d), percebe-se uma semelhança no comportamento da função $\Gamma(r, t)$ entre o perfil original e o perfil transformado,

do modelo DB e de Etching, respectivamente, utilizando os bin ótimos, indicando que o expoente dinâmico, z , pode ser preservado através da utilização da técnica TMHP. Esta semelhança indica que a técnica é robusta na descrição da morfologia e dinâmica de flutuações da superfície original, preservando as correlações entre as alturas. Para modelos que apresentam difusão sobre a superfície, a exemplo do modelo CRSOS, observa-se a formação de estruturas de morros [89,90], que é evidenciada pela presença de tamanho característico. Como exposto nas Fig.3.2(e-f), para o modelo CRSOS, pertencente à classe VLDS, o primeiro zero da função de auto-correlação quantifica o tamanho médio dos morros ξ_o , observa-se uma significativa diferença nos valores de ξ_o , para o perfil original e para o perfil gerado pela técnica TMHP com bin ótimo.

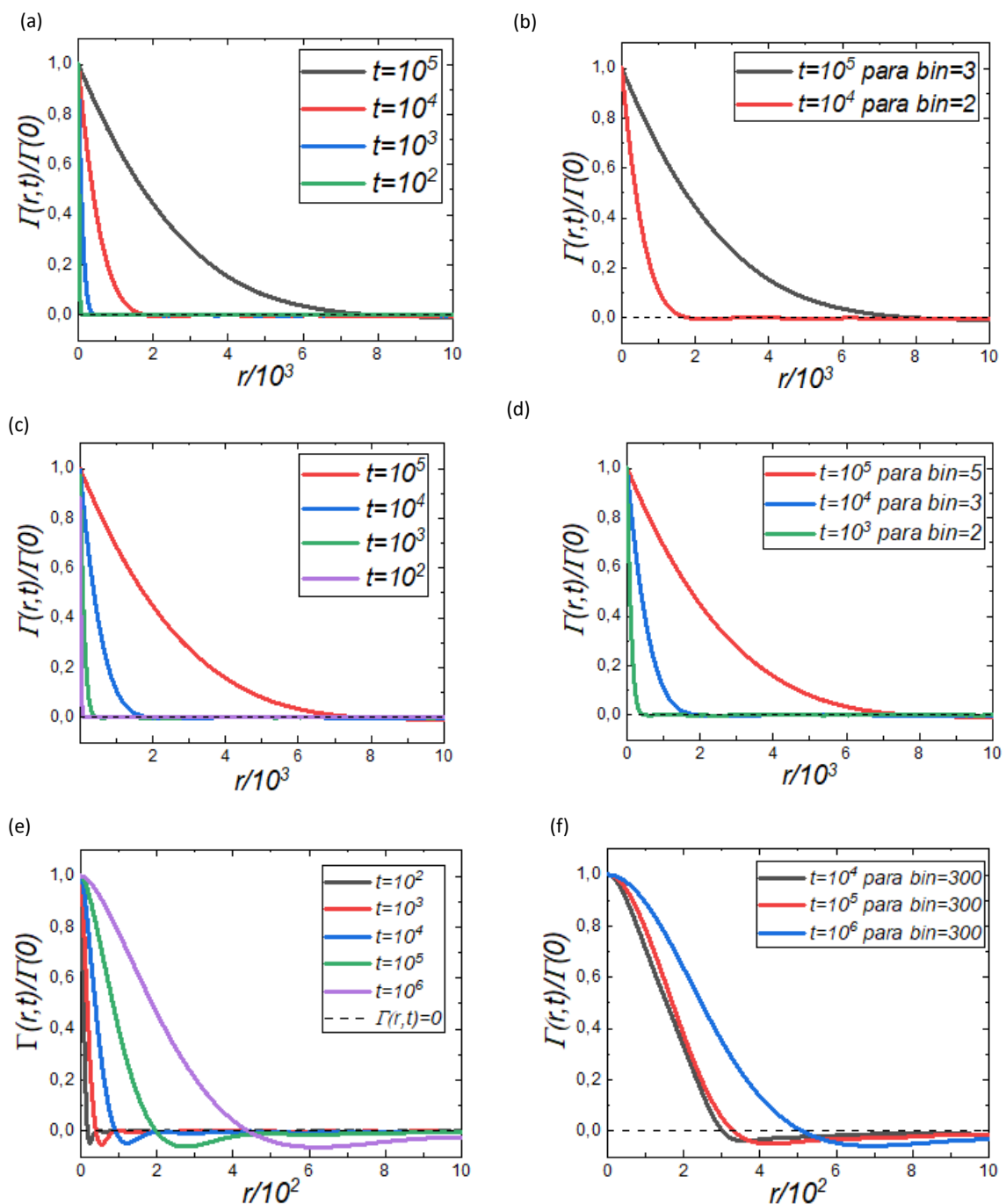


Fig.3.2: Na imagem (a), observa-se o comportamento da função de autocorrelação altura-altura para um perfil do modelo DB em 1 + 1 dimensões, no intervalo de tempo $10^2 \leq t \leq 10^5$ e com um tamanho lateral $L = 2^{19}$, (b) refere-se a aplicação da técnica TMHP para o mesmo perfil de (a), nota-se que o comportamento da função $\Gamma(r, t)$ é semelhante para ambos perfis; (c) e (d) exemplifica a mesma situação para o modelo de Etching; em (e) e (f), se expõe a função $\Gamma(r, t)$, para o modelo CRSOS, com tamanho lateral $L = 2^{14}$ no intervalo de tempo $10^2 \leq t \leq 10^6$.

Conforme mencionado, uma das características da técnica TMHP é a existência de um bin ótimo, que revelou possuir mesmo valor tanto no regime de sobreposição quanto no de não sobreposição de janelas. No limite hidrodinâmico o bin ótimo se comporta como uma característica em comum para determinado modelo discreto. Através de simulações computacionais em larga escala e tempos suficientemente longos, constatou-se que o bin ótimo permanece inalterado. No entanto, conforme exposto na Fig.3.3, o b_{opt} também é suscetível a efeitos de tempo finito. Observa-se que a partir de tempos suficientemente longos, da ordem de $\sim 10^6$, surge uma tendência a saturação para um determinado valor do b_{opt} .

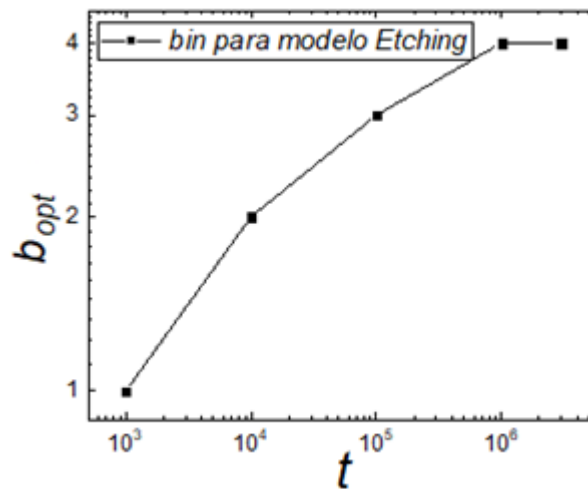


Fig.3.3: comportamento do bin ótimo para cada intervalo de tempo, em escala logarítmica, referente ao modelo de Etching em 1 + 1 dimensões. Através do gráfico $\log_{10}(bin) vs \log_{10}(t)$, é possível identificar o efeito de tempo finito na determinação dos bins, mas a partir de tempos suficientemente longos existe uma tendência a saturação.

Na seção seguinte, analisou-se o efeito da técnica TMHP nas flutuações em diferentes escalas, para tal, calculou-se a rugosidade local $\omega(r, t)$, para diferentes tamanhos de bin. Essa análise foi realizada para encontrar o efeito do tamanho do bin na estatística, principalmente no que concerne a obtenção dos

expoentes de escala. Será adotado a abordagem seguida em [55,88,52], para obtenção do expoente α_{eff} , seguindo a relação:

$$\alpha_{eff} \equiv \frac{d[\ln \omega_i(r)]}{d[\ln r]} \quad (3.3)$$

3.3 Conexão do TMHP com o AFM

Outra motivação para a utilização da técnica TMHP está em sua conexão com o AFM, que consiste em uma técnica utilizada para estudar a morfologia de interfaces crescidas, como em filmes finos construídos a partir da técnica MBE. Além de auxiliar na investigação das propriedades microscópicas em materiais de diferentes composições químicas. Inúmeros trabalhos utilizam o AFM para analisar a propagação de rachaduras e infiltrações em materiais de diferentes composições [92-95]. O AFM é uma técnica de escaneamento da superfície de uma amostra, surgiu na década de 1980 através do desenvolvimento da microscopia de varredura por sonda (*Scanning Tunneling Microscopy-STM*), onde uma ponta de prova interage com a superfície. Portanto, não existe uma completa similitude entre o que é medido pela ponta e a superfície real da amostra. A técnica é essencialmente dividida em dois modos, modo de contato e não contato. No modo contato, durante o processo de varredura a ponta do AFM realiza um contato sobre a amostra, o que resulta em imagens com alta resolução, mas o processo de atrito pode danificar a amostra. Já no modo não contato é fixada uma força eletrostática de referência entre a ponta e superfície, a ponta irá oscilar com uma frequência de ressonância até se atingir o valor de referência, então a altura é computada, assim é construída uma imagem “artificial” que reproduz a superfície. Este modo é ideal para amostras sensíveis a interação mecânica, para mais informações consultar [21]. A técnica AFM possui algumas limitações que prejudicam a qualidade da imagem gerada, a seguir serão analisados alguns destes aspectos e suas implicações.

Uma primeira limitação do AFM a ser citada diz respeito a geometria quase esférica da ponta que interage com a mostra. A ponta do AFM possui um tamanho finito e este fato possui implicações na resolução e obtenção de características importantes a respeito da superfície. Logo, se a ponta não for fina o suficiente e, portanto, não possuir uma boa resolução lateral, ela pode induzir um efeito de dilatação sobre a imagem gerada pelo AFM, que tende a dar um aspecto suave para superfície, criando estruturas que não são originais da amostra, mas sim geradas pela sua forma. Portanto, é necessário analisar as imagens de caráter não topográficas geradas afim de avaliar os efeitos da forma e tamanho da ponta no surgimento de uma dilatação sobre a curvatura da imagem, conforme descrito por [96]. Percebe-se na Fig.3.4, a dilatação gerada pela ponta resulta em uma imagem com curvatura da forma da ponta.

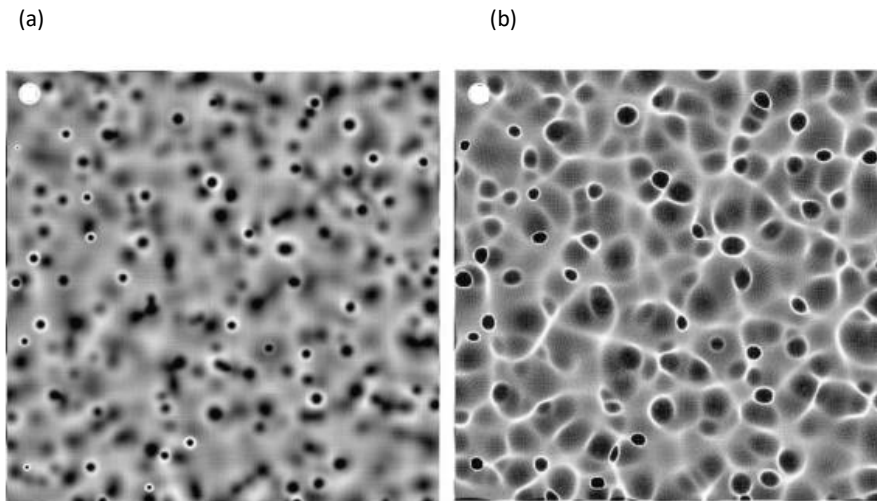


Fig.3.4: Comparação entre imagens (a) e (b), obtidas através de leituras de AFM no modo contato. Observa-se o efeito de dilatação sobre a curvatura da imagem causado por pontas de raios diferentes. A ponta utilizada na leitura de AFM da letra (b) possui raio maior, como consequência a imagem obtida é mais dilatada do que em comparação com a da letra (a). Ilustração retirada de [96].

Com o aperfeiçoamento do AFM, foi evidenciado algumas discrepâncias na obtenção dos expoentes de escala. Possíveis causas para estes problemas foram levantadas, como efeito de ruído, vieses durante o processo de medida, até mesmo a existência de várias classes de universalidade. Mas o trabalho proposto por Lechenault [24], revelou que a origem dos problemas acima relatados está no efeito de suavização promovido pela ponta de tamanho finito durante a varredura da topografia das superfícies auto afins. A Fig.3.5 ilustra o mecanismo de suavização em um perfil auto afim gerado pela leitura do AFM. Esse efeito é observado em diversas aplicações práticas envolvendo medidas de AFM, tais como na obtenção de imagens de pequenas partículas de células e vírus, ou mesmo em substratos de Si(111), conforme exposto nas referências [97,98]. O perfil gerado pelo AFM no modo contato, equivale a encontrar a posição onde o ápice da ponta toca a superfície quando se aproxima por cima. Isto ocorre para determinados valores x_0 , como resultado do processo de suavização gerado pela tamanho finito da ponta é possível definir um operador de suavização $S_R[h](x)$ [24], definido como:

$$\tilde{h}(x) = S_R[h](x) = \max_{x'} [h(x') - g(x - x')] , \quad (3.4)$$

onde $g(x - x')$ caracteriza a forma da ponta de raio R , que pode ser modelada por uma função expressa em termos de R . Este operador é não linear pois $S_R[\mu h] \neq \mu S_R[h]$, e está relacionado a perda de informação ocasionada pela ação do operador de suavização, pois o perfil visto pela ponta é menos rugoso e, portanto, possui menos flutuações em pequenas escalas.

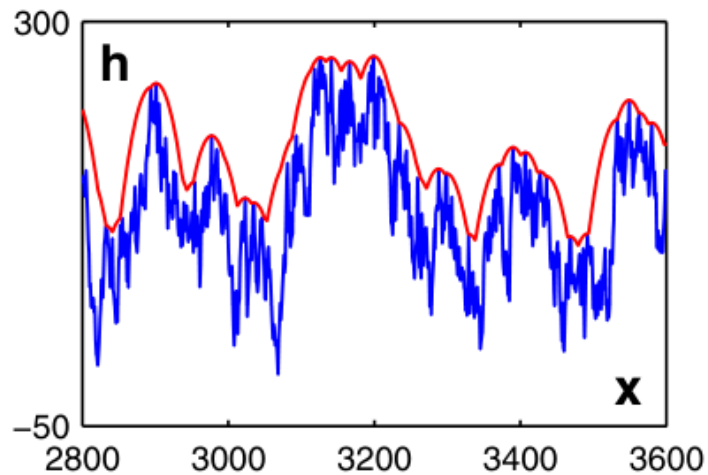


Fig.3.5: A linha vermelha representa a imagem obtida pelo AFM no modo contato, onde constata-se o efeito de suavização gerado pela ponta durante o processo de varredura. A linha azul representa um perfil auto-afim. Imagem retirada de [24].

Outra limitação na técnica de AFM que produz resultados espúrios, está ligado ao desgaste da ponta. A técnica também é utilizada para mensurar a elasticidade de materiais em pequenas escalas [99], para tal, é necessário um amplo conhecimento acerca dos gradientes de forças entre a ponta e amostra, bem como a rigidez da ponta durante o contato com a amostra. Novamente é necessário voltar a atenção para o raio da ponta, pois a elasticidade da amostra não é alterada apenas pela rigidez do contato, mas também pelo raio do contato. Estimar esse contato é uma tarefa árdua o que torna questionável as medições usando AFM no modo contato. Nas referências [100,101], encontram-se mais informações acerca de um método baseado na teoria de compressão elástica de um corpo axial simétrico, afim de se derivar uma equação que forneça a espessura da ponta, bem como sua forma e a elasticidade do material analisado.

Os efeitos gerados pela ponta são importantes para a leitura do AFM no modo contato, sua forma, o raio de contato e a rigidez. Além destes aspectos, foi reportado em [102] que para tempos curtos o contato da ponta com a amostra também pode induzir um excesso de crescimento, gerado pela convolução da ponta com a superfície, o que acaba imprimindo uma característica KPZ na leitura do AFM. Como consequência, os expoentes reportados tendem a ser tipicamente KPZ. Na referência supracitada, foi proposta uma técnica para descartar os expoentes espúrios gerados pelo excesso de velocidade induzida pela ação da ponta no contato com a superfície. O excesso de velocidade gerado pela convolução da ponta produz imagens de AFM com estruturas semelhantes a morros na superfície, conforme visto na Fig.3.6. Este comportamento é frequentemente observado quando o tamanho da ponta é semelhante ao comprimento característico de correlação das superfícies ásperas.

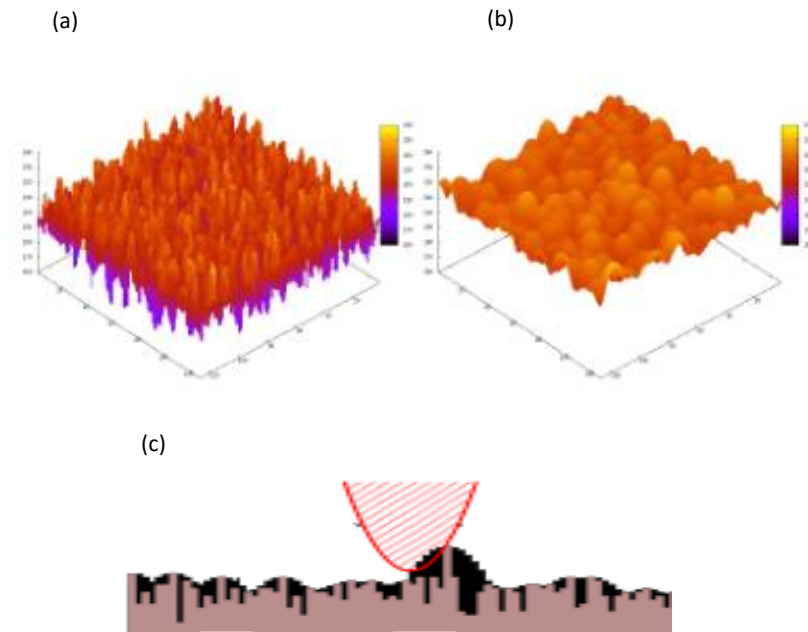


Fig.3.6: (a) Perfil pertencente ao modelo MBE em $2 + 1$ dimensões, para o tempo $t = 250$, o tamanho do sistema é 2048×2048 ; (b) mostra a interface obtida usando a técnica AFM no modo contato; (c) ilustração do efeito de excesso de crescimento induzido pela ponta da sonda durante a varredura. Imagem modificada da referência [102].

Há poucos trabalhos experimentais reportados na literatura onde estudam-se o comportamento assintótico da classe KPZ, em $2 + 1$ dimensões, durante os instantes iniciais. Parte da dificuldade reside no fato de que os expoentes são obtidos no limite hidrodinâmico, isto é, para longos intervalos de tempo. Este problema é contornado através da análise de flutuações na interface de filmes. Um exemplo reportado em [103] utilizou um filme de CdTe em um substrato polimérico gerado através da técnica de deposição de parede quente em alto vácuo², e verificou a existência de um estado pseudo-estacionário nos instantes iniciais. Neste estado, a rugosidade e as correlações espaciais permanecem em um regime estacionário (*i.e.*, não varia com o tempo). Através das leituras de AFM é possível concluir que a característica KPZ observada em filmes de CdTe, emerge das estruturas em formas de pacotes de grãos que se estendem pela superfície, como ilustrado na Fig.3.7, gerando um excesso de velocidade no crescimento. Foi reportado para este caso que a equivalência com classe de universalidade KPZ não surge em razão do efeito de tamanho finito da ponta, pois o tamanho médio dos grãos é consideravelmente menor a ponta da sonda.

² Filmes finos de CdTe, produzidos através da técnica de deposição em parede quente em alto vácuo, mostrou-se uma técnica tão eficiente quanto a epitaxia por feixe molecular para a produção de filmes com alta qualidade.

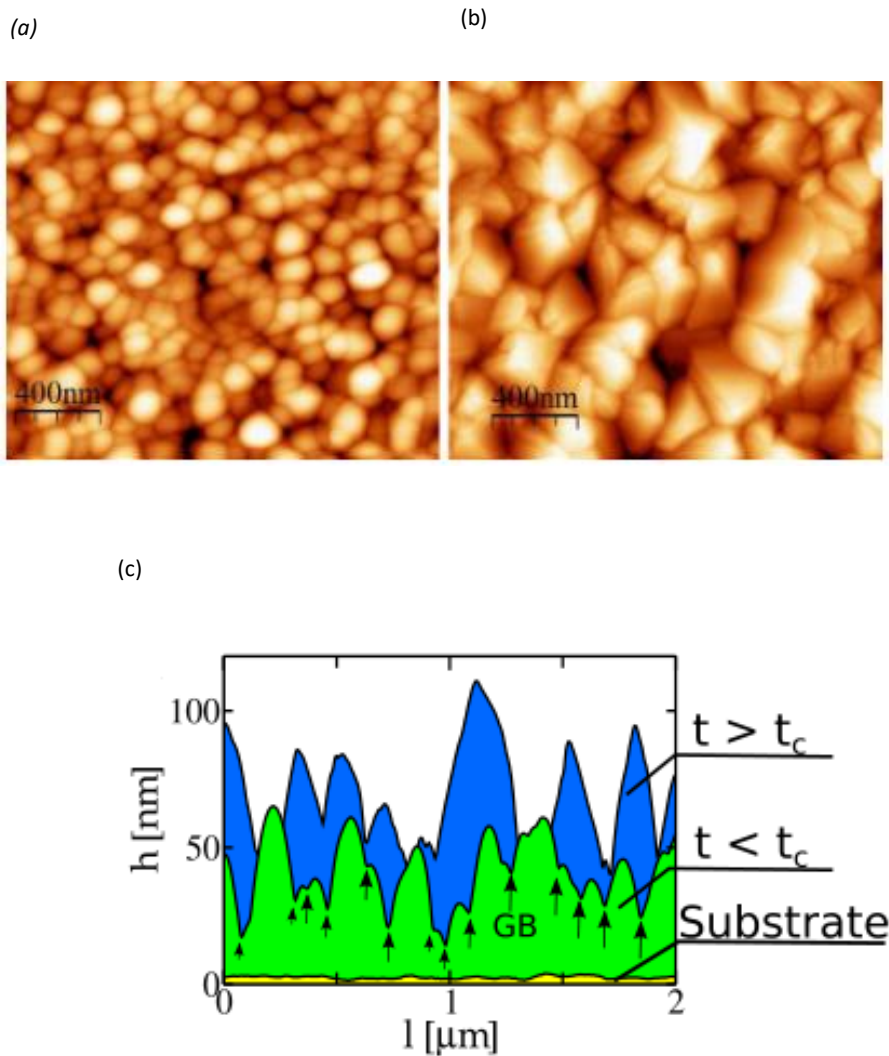


Fig.3.7: Imagens referentes a leituras realizadas pelo AFM para filmes de CdTe; (a) representação da leitura de AFM após 60 minutos, onde o crescimento se dá no regime pseudo-estacionário; (b) após 6 horas, observa-se o surgimento da escala KPZ. A formação de pacotes de grãos está relacionada ao excesso de velocidade durante o crescimento; (c) as setas pretas indicam os locais onde existe a fronteira do grão. Imagem retirada de [103].

Após ser mencionado algumas características do AFM e algumas limitações, que estão intimamente relacionadas ao tamanho finito da ponta e sua resolução lateral, é possível introduzir conexão do AFM no modo não contato com a técnica TMHP. Simulações computacionais realizadas para uma variação do AFM no modo não contato, denominada de microscopia de força eletrostática, revelou a existência de uma semelhança entre o perfil produzido pela varredura do AFM com um perfil gerado através da técnica TMHP [37], conforme observado na Fig.3.8. Em outras palavras, um perfil produzido pela técnica TMHP consegue reproduzir o que é “enxergado” pela ponta da sonda durante a varredura da superfície de uma amostra.

Os resultados de simulações apresentados nessa seção são referentes a uma variante do AFM no modo não contato, denominada microscopia de força eletrostática [104-107]. As simulações foram realizadas utilizando método dos elementos finitos, considerando que o substrato é plano e está aterrado, ou seja, o potencial eletrostático é constante. A ponta da sonda na sua extremidade possui um formato de semicírculo e oscila verticalmente. É definida uma força eletrostática de referência entre a ponta e a superfície da amostra. Durante a varredura é computada a altura em que a ponta atinge a força de referência, e então, se desloca horizontalmente para o próximo sitio. Através deste processo é possível traçar um gráfico de força versus distância. Em seguida é realizado uma interpolação para encontrar a altura em que se atingiu a força de referência, e com sucessivas medidas torna-se exequível obter a topografia que resulta da simulação computacional que busca representar o AFM no modo não contato.

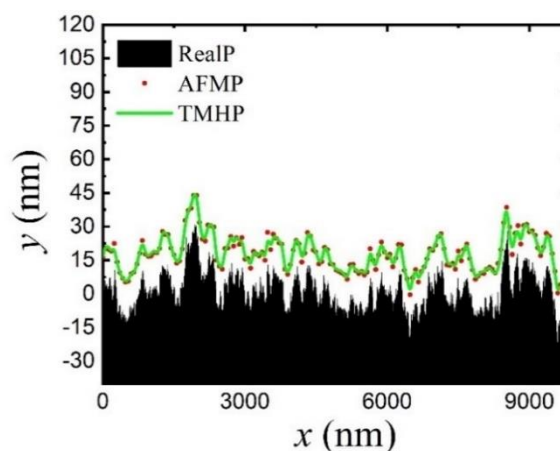


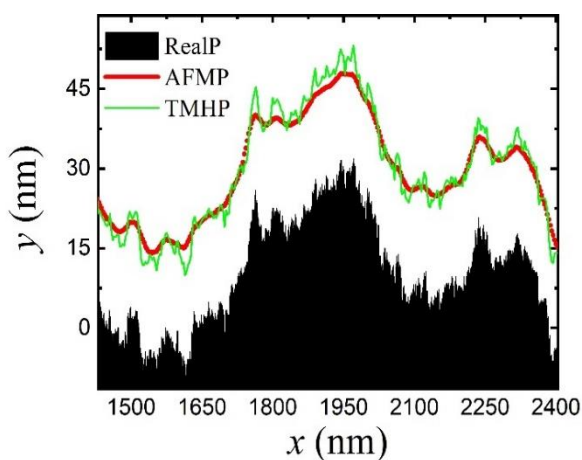
Fig.3.8: Perfil para o modelo DB em 1 + 1 dimensões, com 10^4 monocamadas e tamanho lateral $L = 2^{15}$. A linha verde representa o perfil gerado pela técnica TMHP, enquanto que os pontos vermelhos foram obtidos através de leituras da microscopia de força eletrostática. A ponta da sonda possui raio equivalente a 200 parâmetros de rede, onde cada parâmetro de rede equivale a $3 \times 10^{-10} \text{ m}$ (3 \AA), portanto o raio equivale a 60 \AA . Foi utilizado uma força eletrostática de referência de $5 \times 10^{-13} \text{ N}$, ou 0.5 pN . Observa-se a correlação entre a leitura do AFM e o perfil gerado pela técnica TMHP, os pontos vermelhos praticamente colapsam a curva verde. Ilustração cedida por [37].

Portanto, a técnica TMHP mostrou-se útil na análise do perfil gerado através de simulações para o AFM no modo não contato, pois consegue reportar as distorções produzidos pela ponta da sonda. Assim como no modo contato, foi observado um efeito de suavização do perfil que se reflete em rugosidades locais menores. Apesar deste efeito também ter sido observado no modo contato, o mecanismo de suavização observado no perfil gerado pela simulação da microscopia de força eletrostática, é decorrente da redução nas flutuações estocásticas nas regiões de picos.

Existe uma limitação na conexão da técnica TMHP com a microscopia de força eletrostática, que surge quando se analisa flutuações de pequenos comprimentos de onda. Os resultados das simulações indicam que a leitura do AFM no modo não contato produz um perfil mais suave e menos rugoso que o original, um perfil que não captura as flutuações estocásticas em pequenas escalas. Devido ao efeito de suavização promovido pela ponta, o perfil simulado não consegue “enxergar” as flutuações locais da amostra. Conforme exposto na Fig.3.9(b), este fato se reflete diretamente na rugosidade local, $\omega(r,t)$, que caracteriza as flutuações das alturas dentro de cada janela. Neste caso, observar-se-á que a curva da rugosidade local do perfil gerado pela leitura do AFM difere da curva do perfil original e do perfil gerado pela técnica TMHP, na região correspondente a pequenas escalas. Contudo, em grandes escalas este comportamento anômalo é contornado, o que implica que para grandes valores de bins o TMHP torna-se robusto na descrição da superfície obtida através da varredura do AFM no modo não contato. Ademais, constata-se que a técnica THMP produz um perfil com rugosidade local ligeiramente maior que a do perfil original e do perfil transformado de alturas máximas.

Vale ressaltar que devido ao grande tempo computacional requerido, estes resultados referem-se a simulações com uma realização independente. Então é esperado que esse comportamento seja efeito de flutuações decorrentes de poucas médias configuracionais. Em geral o perfil gerado pela técnica TMHP produz rugosidades locais menores que a do perfil original. Ademais, no apêndice deste trabalho, consta uma comparação entre o TMHP e o perfil de alturas máximas. Em grandes escalas, no regime de bins não sobrepostos, o perfil gerado por alturas máximas produz um perfil com estruturas de terraços que prejudica o *scaling*. Por conseguinte, neste regime, é esperado que a técnica TMHP forneça melhores correções para o expoente efetivo de rugosidade local.

(a)



(b)

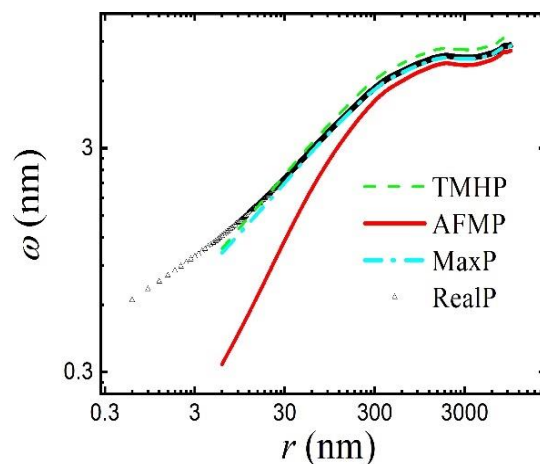


Fig.3.9: (a) O perfil sombreado foi obtido através de simulações para o modelo DB em 1 + 1 dimensões, com um tamanho lateral $L = 2^{15}$, e com 10^4 monocamadas. A curva vermelha é referente a leitura do AFM no modo não contato com uma ponta de raio 30\AA , e uma força de referência 0.2 pN (pico newtons). A curva verde representa um perfil gerado pela técnica TMHP, nota-se que apesar de existir uma semelhança entre o perfil original e o TMHP, em pequenas escalas, a leitura produzida pelo AFM destoa do perfil original e do TMHP; (b) as diferenças da rugosidade local entre o perfil gerado pelo AFM, o perfil original e o TMHP, emergem em pequenas escalas. Ilustração cedida por [37].

De fato, em grandes escalas, existe uma equivalência maior do perfil produzido pela técnica TMHP com o perfil gerado pela leitura do AFM no modo não contato. Analisando a Fig.3.10(a), observa-se que em grandes escalas a curva da rugosidade local do perfil gerado a partir de simulação computacional para a leitura do AFM se assemelha com a rugosidade local do perfil gerado pelo TMHP. Mas em pequenas escalas o perfil gerado pela microscopia de força eletrostática é muito suave e não captura as flutuações contidas no perfil original. Portanto, uma das vantagens da utilização da técnica TMHP está na sua ligação com o AFM no modo não contato, principalmente na região correspondente a grandes escalas. Na Fig.3.10(b), observa-se que o erro percentual para a rugosidade local do perfil gerado pela técnica TMHP é menor quando comparado ao do perfil de máximas alturas.

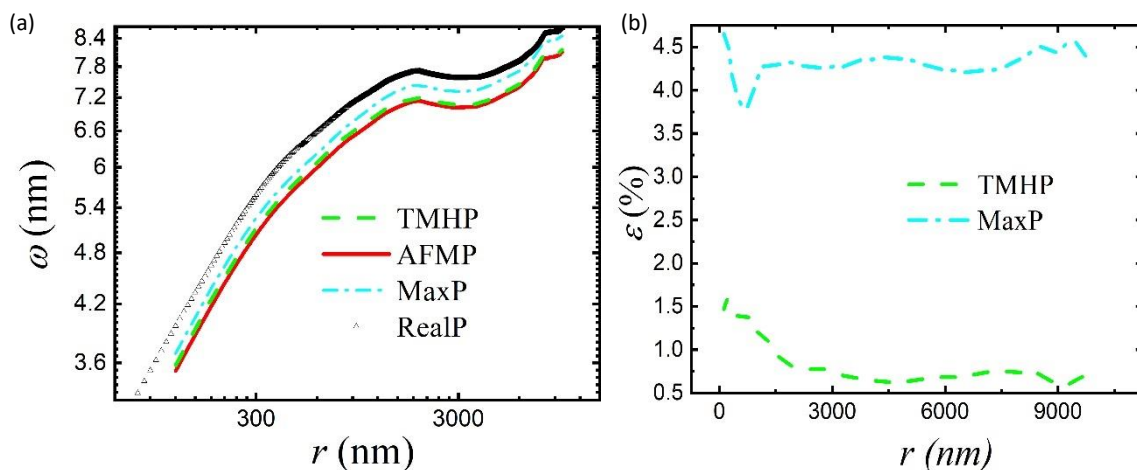


Fig.3.10: (a) curvas de rugosidade local $\omega(r, t)$ em função de r para o modelo DB em 1 + 1 dimensões, com tamanho lateral de $L = 2^{15}$ e $t = 10^4$ monocamadas; (b) erro das rugosidades para o perfil transformados de alturas médias e perfil de alturas máximas em relação ao perfil gerado computacionalmente para a leitura do AFM no modo não contato. Ilustração cedida por [37].

3.4 Aplicação da técnica TMHP em modelos discretos da classe KPZ

Será realizado uma análise sistemática da aplicação da técnica TMHP para os modelos de Etching e DB, ambos em 1 + 1 dimensões, mostrando os efeitos de tamanho e tempo finito na obtenção das correções para o expoente de rugosidade local através do bin ótimo. Os resultados serão apresentados considerando uma média configuracional realizada sobre 500 realizações independentes, para atenuar as flutuações nos resultados. O comportamento da rugosidade local para os diferentes bins também foi investigado e constatou-se uma tendência para todas as simulações: a utilização do TMHP suaviza as flutuações nas regiões de picos, por este motivo, a rugosidade local para diferentes bins foi ligeiramente menor que a obtida através do perfil original. Além disso, existe uma diferença da rugosidade local em pequenas escalas que é semelhante ao comportamento observado na Fig.3.9(b). A partir de tempos suficientemente pequenos o TMHP deixa de ser útil, pois não será possível obter bin ótimo. Portanto, para cada modelo analisado existe um tempo inicial para aplicação da técnica TMHP, abaixo desse tempo não se observa vantagem na utilização da técnica para obtenção de correção do expoente α_{eff} , pois o platô estará localizado na curva correspondente ao $bin = 1$, que corresponde ao próprio perfil original. Outra propriedade relacionada ao TMHP é que o bin ótimo se mantém inalterado tanto no regime de sobreposição quanto na não sobreposição de bins. Este estudo é necessário na conexão com a simulação do AFM, pois em um cenário ideal a ponta da sonda teria uma resolução lateral que possibilitaria varrer toda a superfície da amostra, de maneira análoga ao que ocorre no perfil gerado pela técnica TMHP no modo de sobreposição. Porém, na prática, a ponta da sonda possui um tamanho finito e não consegue fazer a varredura de todas as flutuações locais de altura, portanto a situação de não sobreposição é a que mais se assemelha do que acontece experimentalmente. Todavia, conforme exposto adiante, recentes avanços utilizando pontas associadas a nanotubos de carbono, estão melhorando consideravelmente a resolução lateral da ponta.

Na Fig.3.11(a), observa-se a obtenção do expoente efetivo de rugosidade local α_{eff} para o modelo de Etching, pertencente à classe de universalidade KPZ, utilizando o perfil gerado pela técnica TMHP. Este modelo quando comparado com o da Deposição Balística não apresenta fortes correções de escala, mas é conveniente observar o efeito da aplicação da técnica para diferentes modelos da classe KPZ, afim de se investigar o comportamento dos expoentes e do bin ótimo e compará-los. Percebe-se que o bin ótimo é $b_{opt} = 4$, para este valor de bin existe uma visível região estacionário, ou platô, que não é presente para outros bins. Portanto, existe um tamanho de bin em que pode ser

possível obter uma melhor correção para o expoente α_{eff} , em comparação aos demais valores de bins. Na Fig.3.11(b) obtêm-se na região estacionária, através da técnica TMHP para o bin ótimo, um expoente $\alpha_{eff} = 0,491(1)$, enquanto que para o perfil original observa-se um discreto platô que fornece um expoente $\alpha_{eff} = 0,488(6)$. Na Fig.3.11(d) observa-se a semelhança existente entre o perfil original e o gerado pela técnica TMHP a partir do $b_{opt} = 4$. Outro aspecto que corrobora a obtenção do expoente α_{eff} a partir da técnica TMHP, é que através de um ajuste linear realizado na curva da rugosidade local $\omega(r, t)$ em função de r , conforme consta na Fig.3.11(c), no intervalo em que o platô da Fig.3.11(b) se estende, obtêm-se um *slope* similar ao expoente encontrado através do TMHP. Esta constatação revela uma lei de potência que surge devido a correção do *scaling* promovida pela técnica.

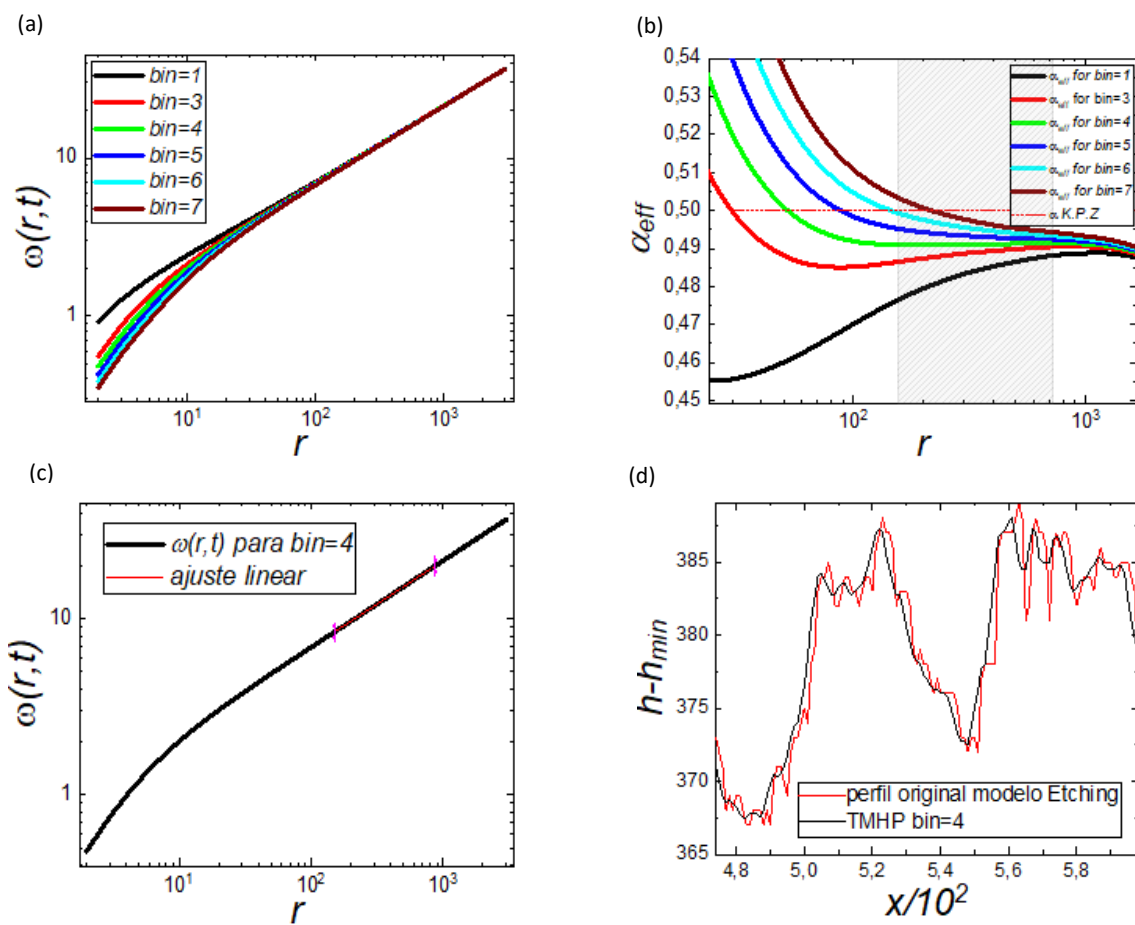


Fig.3.11: (a) gráfico da rugosidade local, $\omega(r, t)$, em função do tamanho da janela, em escala logarítmica. Percebe-se que à medida que o bin aumenta existe a tendência de diminuir as flutuações em escalas locais e conseqüentemente a rugosidade local diminui. Observa-se esta implicação na diferença de $\omega(r, t)$ para os demais bins quando comparado com a do $bin = 1$, que equivale ao perfil original; (b) utilizando a equação (3.3) para obtenção do α_{eff} . Percebe-se que existe um platô, representado pela região hachurada, para o $b_{opt} = 4$, que, portanto, equivale ao bin ótimo para o modelo de Etching, com tamanho lateral $L = 2^{19}$ e tempo $t = 10^6$; (c) ajuste linear na região depreendida pelo platô da letra (b), nota-se que a inclinação é correspondente ao α_{eff} obtido anteriormente; (d) comparação entre o perfil original e o perfil gerado pelo TMHP utilizando o b_{opt} .

Conforme discorrido anteriormente, no limite hidrodinâmico o bin ótimo apresenta uma tendência a ser constante, contudo, fora deste limite ele é suscetível ao efeito de tempo finito. Será exposto na Fig.3.12(b) a obtenção dos expoentes em um tempo menor. O expoente obtido neste caso é $\alpha_{eff} = 0,482(1)$. A Fig.3.12(d) exibe uma comparação entre o perfil original e o gerado pela técnica TMHP utilizando o bin ótimo. Nota-se que os valores dos bins ótimos caem uma unidade para cada intervalo de tempo (que neste caso, é dado como potência de dez), mas essa constatação não se trata de um comportamento sistemático.

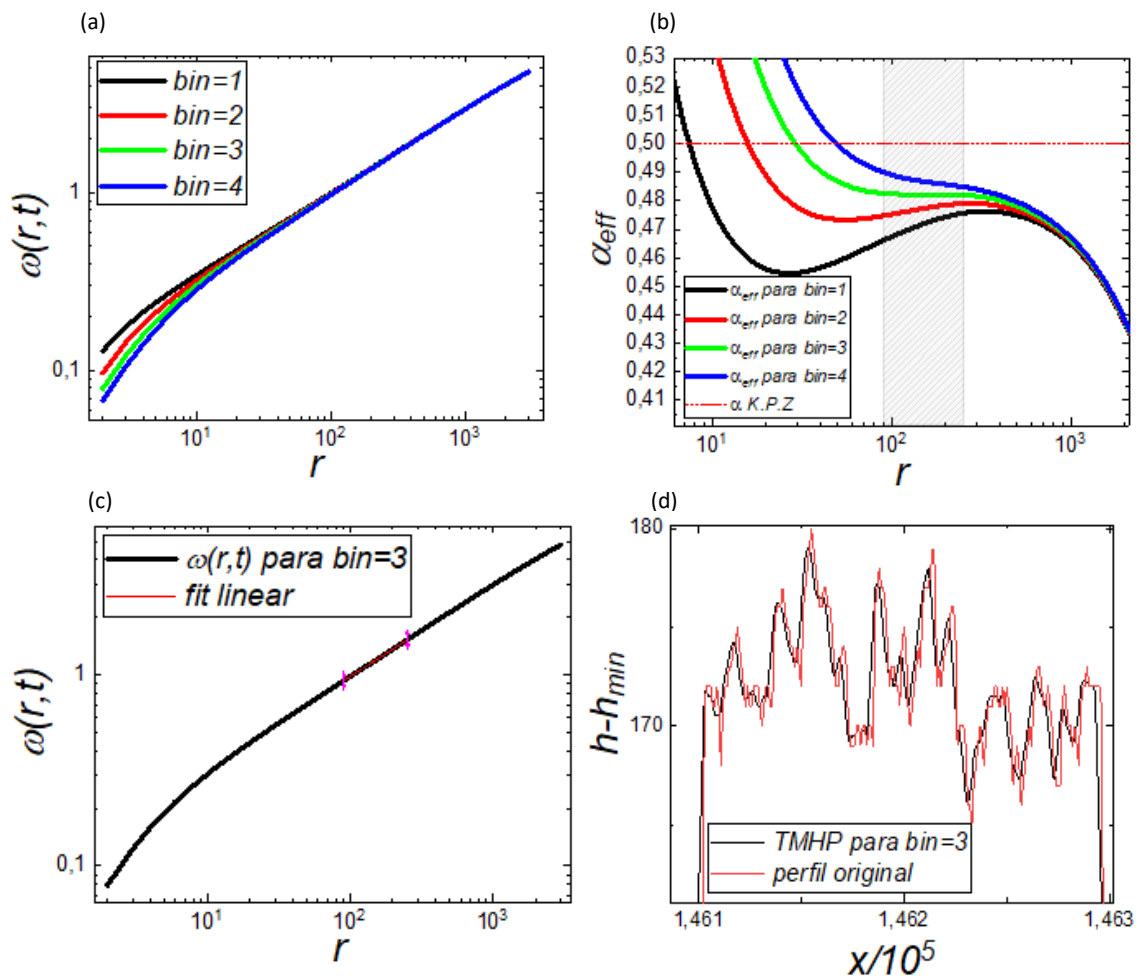


Fig.3.12: (a) curvas de rugosidade local em função de r para diferentes bins no modelo de Etching com tempo $t = 10^5$ e $L = 2^{19}$; (b) obtenção do expoente de rugosidade local, nota-se que o platô é atingido na região correspondente a $b_{opt} = 3$, que é uma unidade menor que o observado para o tempo imediatamente superior; (c) ajuste linear realizado na região referente a região do platô, o *slope* obtido é similar ao expoente α_{eff} ; (d) semelhança entre o perfil gerado pela técnica TMHP e o perfil original, foi dado um zoom de 10 vezes para observar as flutuações locais.

Na Fig.3.13(b), observa-se novamente essa tendência para o tempo $t = 10^4$, e o bin ótimo é uma unidade menor que a do tempo analisado anteriormente na Fig.3.12. Ainda na Fig.3.13(b) o expoente medido foi $\alpha_{eff} = 0,466(8)$, obtido através de um perfil gerado pela técnica TMHP com $b_{opt} = 2$. Além disto, tão menor será o valor do expoente α_{eff} quanto menor for o intervalo de tempo, já que o sistema se afasta do limite hidrodinâmico. Pode-se explicar este comportamento devido ao efeito de tempo finito, no entanto, analisando a Fig.3.13(d), percebe-se que também existe uma explicação de natureza geométrica para esta constatação, que reside na semelhança do perfil gerado pela técnica TMHP com o perfil original. À medida que o intervalo de tempo decresce o bin ótimo também diminui e o perfil gerado pela técnica TMHP, a partir de bins pequenos, é capaz de preservar mais fielmente as flutuações locais de altura do perfil original. Isto implica em menores reduções de flutuações estocásticas nas regiões de vales e, conseqüentemente, uma menor correção para a escala. Já para o tempo $t = 10^3$ o TMHP perde sua aplicabilidade, pois $b_{opt} = 1$.

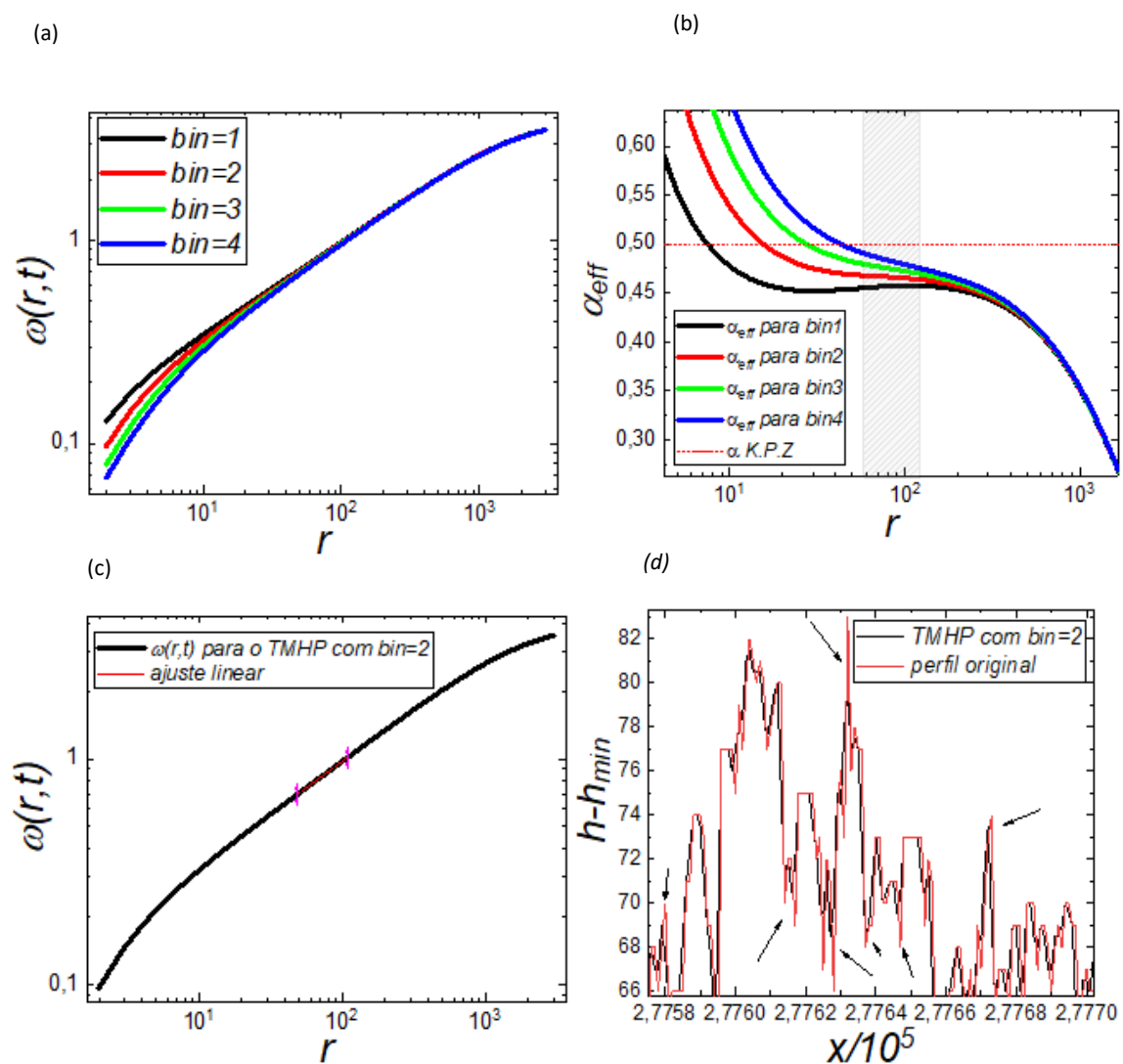


Fig.3.13: (a) curvas da rugosidade local, $\omega(r, t)$, em função de r para diversos bins no modelo de Etching para o tempo $t = 10^4$ e $L = 2^{19}$. Para este tempo existe uma sutil diferença nas curvas da rugosidade entre o perfil original e os demais valores de bins, o que contrasta com o observado para a rugosidade local em tempos superiores; (b) expoente efetivo de rugosidade local, obtido através de um perfil gerado pela técnica TMHP com $b_{opt} = 2$. A região sombreada, que representa o platô, é significativamente menor quando comparado com os casos anteriores; (d) semelhanças entre o perfil original e o perfil gerado pelo TMHP. Os perfis praticamente colapsam, possuindo flutuações de alturas semelhantes, foi dado um zoom de 10 vezes.

Uma vez explorados os efeitos da aplicação da técnica TMHP em diferentes intervalos de tempo, analisar-se-á a aplicação do TMHP para sistemas com tamanho lateral no intervalo $2^{17} \leq L \leq 2^{18}$, para averiguar possíveis efeitos de tamanho finito na obtenção do expoente α_{eff} . Enquanto se operou neste intervalo de tamanho lateral o bin ótimo permaneceu inalterado, como mostrado na Fig.3.14(b), o expoente obtido através do perfil gerado pela técnica TMHP foi $\alpha_{eff} = 0,498(9)$. Contudo, apesar da constância do b_{opt} , a correção do expoente de rugosidade local para o tamanho $L = 2^{18}$ é ligeiramente menor que a correção observada no tamanho lateral imediatamente superior, evidenciando um efeito de tamanho finito. A Fig.3.14(d) revela a semelhança entre o perfil original e o gerado pela técnica TMHP.

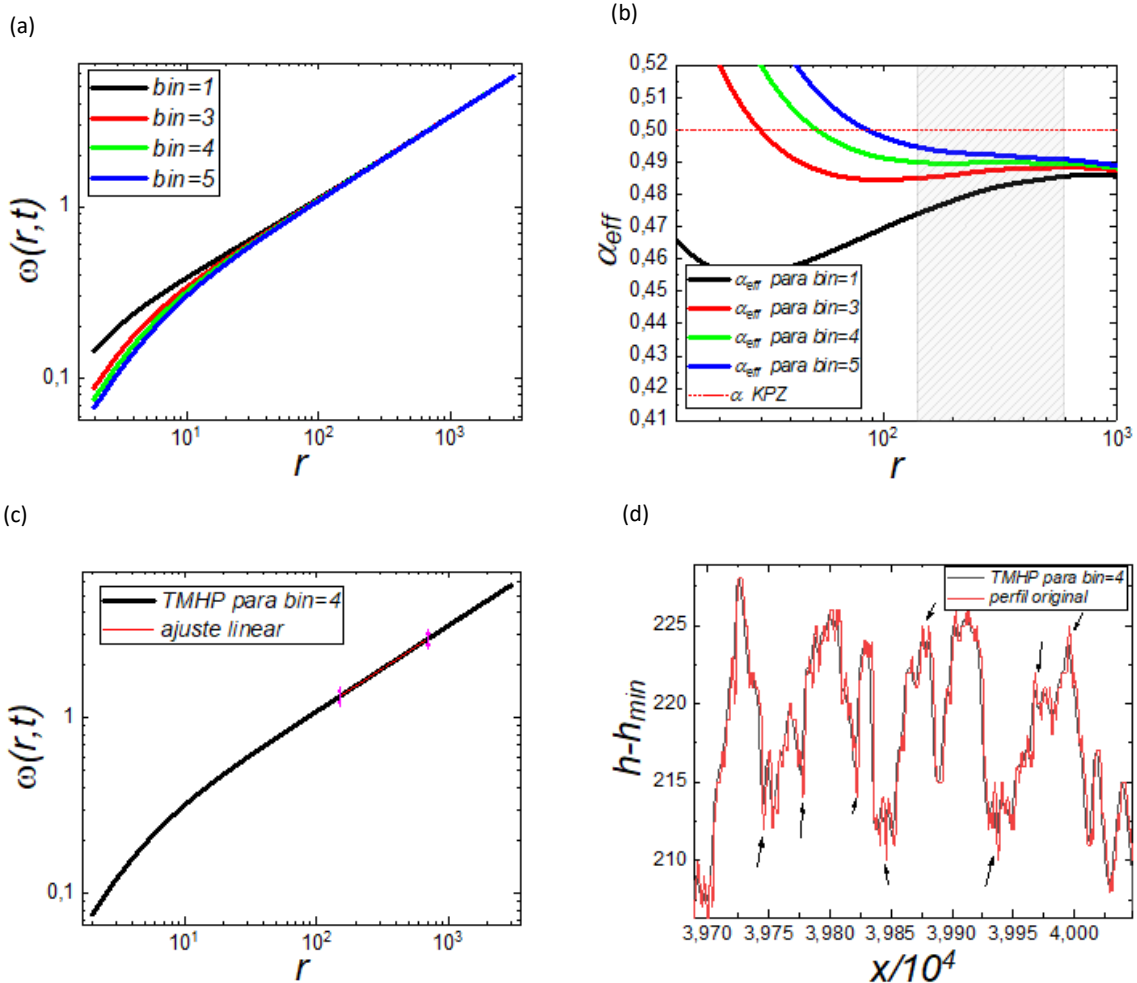


Fig.3.14: (a) curvas de rugosidade local para diferentes bins no regime de sobreposição para um perfil do modelo de Etching, com tamanho lateral $L = 2^{18}$ e 10^6 monocamadas depositadas; (b) expoente de rugosidade local obtido através da técnica TMHP com $b_{opt} = 4$; (c) a reta vermelha na curva da rugosidade local, representa um ajuste linear na região correspondente ao platô da letra (b). O coeficiente angular (*slope*) obtido foi semelhante ao expoente α_{eff} encontrado anteriormente, com coeficiente de Pearson $r = 0,999$; (d) Comparação entre o perfil gerado pela técnica TMHP e o perfil original, as setas pretas indicam as reduções de flutuações nas regiões dos picos e vales promovidas pela aplicação da técnica TMHP.

Para finalizar a análise do TMHP aplicado ao modelo de Etching no regime de sobreposição de bins, expõe-se na Fig.3.15(b), que para o último tamanho investigado, de $L = 2^{17}$, o b_{opt} ainda foi preservado. Na Fig.3.15(b) observa-se que há um platô na curva referente ao $b_{opt} = 4$ e obtém-se $\alpha_{eff} = 0,490(2)$; Novamente se constata que o valor do α_{eff} foi sutilmente comprometido pelo efeito de tamanho finito, uma vez que o expoente para este caso foi menor que o do expoente obtido anteriormente para o tamanho $L = 2^{18}$.

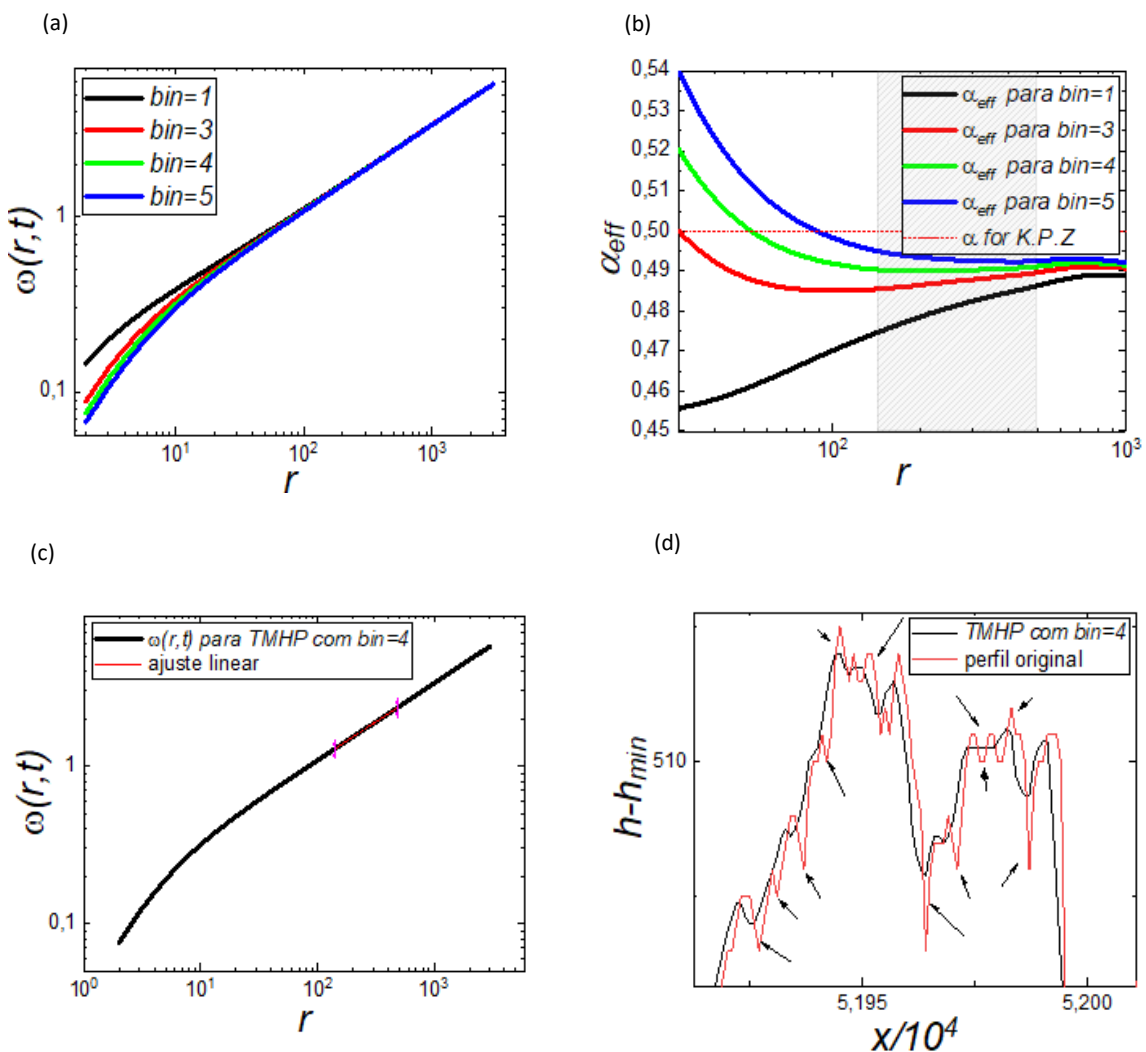


Fig.3.15: (a) curvas da rugosidade local, $\omega(r, t)$, em função de r , para o modelo de Etching utilizando a técnica TMHP com distintos tamanhos de bins, com tamanho lateral $L = 2^{17}$ e tempo $t = 10^6$; (b) expoente efetivo de rugosidade local para diferentes valores de bins; (c) ajuste linear na região do platô em que foi observado o expoente, o *slope* obtido foi similar ao α_{eff} ; (d) comparação entre o perfil original e o perfil gerado a partir do TMHP. As setas indicam as flutuações locais para ambos perfis, foi dado um zoom de 10 vezes.

Até então, introduziu-se a técnica TMHP para o regime de bins sobrepostos, contudo, existe a necessidade de entender o comportamento de um perfil transformado de alturas médias construído a partir de bins não sobrepostos. Conforme citado anteriormente, o perfil gerado pela técnica TMHP possui uma semelhança com o perfil medido por uma simulação da microscopia de força eletrostática. Contudo, devido ao efeito de tamanho finito da ponta há uma série de fatores que impõe limitações na qualidade da imagem obtida. Dentre as limitações, destaca-se a resolução lateral da ponta que é regida pela geometria do ápice da sonda. Como consequência, a ponta não consegue realizar a varredura de todas as características e flutuações locais de altura das superfícies complexas ou auto afins. Todavia recentes avanços na área estão conseguindo atenuar tais limitações. Através da utilização de nanotubos de carbono, com raio de curvatura menor que 10nm, ligados diretamente a ponta da sonda do AFM [108-111]. Conforme ilustrado na Fig.3.16, com o uso de nanotubos de carbono é possível capturar mais fielmente as flutuações locais e melhorar a resolução lateral do AFM, produzindo imagens mais fidedignas. Com a utilização deste aparato, é possível corroborar o uso da técnica TMHP no regime de sobreposição de bins como uma ferramenta que se conecta à simulação do AFM no modo não contato. Uma vez que nesta situação, faz-se possível que a ponta efetue a leitura ao equivalente a cada sítio da rede, de maneira análoga a construção de um perfil gerado pela técnica TMHP na sobreposição de bins.

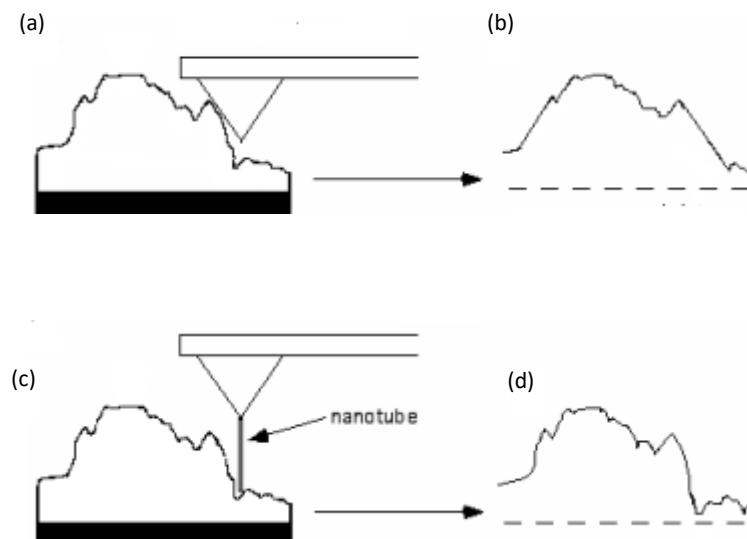


Fig.3.16: (a) Representação da ponta de uma sonda com formato piramidal. Nota-se que devido à geometria da ponta existe uma limitação na resolução lateral e durante o escaneamento algumas flutuações são negligenciadas; (b) perfil visto pela ponta de formado piramidal; (c) esquematização de uma varredura de AFM com uma ponta ligada a um nanotubo de carbono, em detrimento disto, há uma melhoria na resolução lateral, pois a geometria da ponta consegue detectar as flutuações em pequenas escalas; (d) perfil obtido pela leitura do AFM com nanotubo de carbono, observa-se que o perfil gerado possui maior semelhança com a amostra em comparação com a imagem resultante do AFM com a ponta tradicional. Ilustração retirada de [108].

Na Fig.3.17, aplicou-se a técnica TMHP com bins completamente não sobrepostos para o modelo de Etching. Conforme observado na Fig.3.17(c), há semelhança entre as rugosidades locais, $\omega(r,t)$, e os expoentes de rugosidade local, α_{eff} , com obtidos no regime de sobreposição de bins. Na Fig.3.17(b) observa-se que a curva referente ao $bin = 4$, apresenta um platô e fornece um expoente de rugosidade local, $\alpha_{eff} = 0,49(1)$, sendo, portanto, o candidato a bin ótimo de maneira semelhante ao analisado para o regime de sobreposição. Em pequenas escalas o perfil gerado pelo TMHP, tanto na sobreposição quanto na não sobreposição de bins, irá produzir correções similares para o valor do expoente α_{eff} .

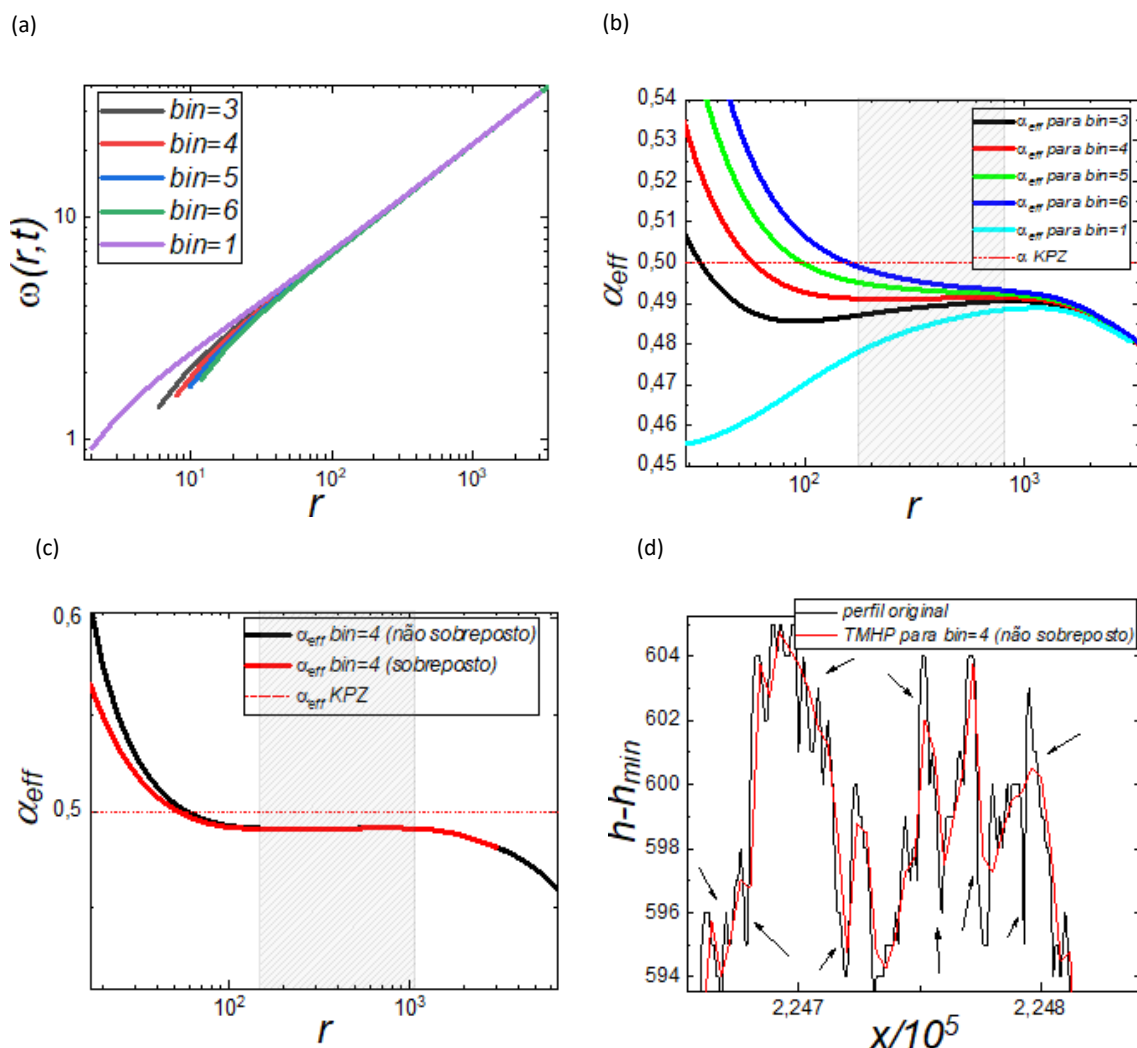


Fig.3.17: (a) curvas de rugosidade local em função de r , obtidas através da técnica TMHP com diferentes valores de bins no modo não sobreposição para o modelo de Etching em 1 + 1 dimensões, com tamanho lateral $L = 2^{19}$ e 10^6 monocamadas depositadas; (b) expoente efetivo de rugosidade local para diferentes valores de bins; (c) comparação entre os platôs obtidos pelo TMHP com o $bin_{opt} = 4$ para os regimes de sobreposição e não sobreposição; (d) comparação entre o perfil original e o perfil gerado pela técnica TMHP com o bin ótimo não sobreposto. As setas pretas indicam as regiões onde a técnica suavizou as flutuações nos picos e vales.

Até este momento foi dada atenção para obtenção do expoente de rugosidade, no entanto, será mostrado que a técnica TMHP também possibilita a obtenção do expoente de crescimento. Na maioria das vezes é contraproducente esperar a interface atingir a saturação, de modo que o expoente de rugosidade, α , torna-se inacessível através de leituras via microscopia de força atômica. Portanto é necessário analisar a técnica TMHP no que concerne a obtenção do expoente de crescimento β . Para tal, avaliou-se a rugosidade global de diferentes perfis construídos a partir da técnica TMHP e conforme exposto no inset da Fig.3.18, percebe-se que os pontos ficam desajustados, sugerindo a necessidade de implementar uma escala para os dados no eixo vertical e horizontal. A implementação de uma escala para o colapso de dados consiste na obtenção de expoentes de escala que fornecem o melhor ajuste linear, o que equivale a encontrar expoentes que maximizem o coeficiente de correlação.

É possível extrair uma relação de escala utilizando os expoentes que fornecem o melhor colapso, através de:

$$W \sim b^\lambda f\left(\frac{t}{b^\nu}\right) , \quad (3.5)$$

onde b é o bin, os expoentes λ e ν referem-se aos expoentes que fornecem o melhor colapso no eixo vertical e horizontal, respectivamente. Para o regime de sobreposição, os expoentes de colapso são: $\nu = 1,738$, $\lambda = 0,573$. O fit linear na região do $b_{opt} = 4$ fornece um expoente de crescimento global $\beta = 0,329$, que está em acordo com os expoentes da classe KPZ. Na Fig.3.18, observa-se a existência de uma região de crossover, cuja abscissa é dada por $p_c = t/b^\nu$. Este comportamento sugere que um perfil gerado pela técnica TMHP a partir de valores de bins que sejam maiores que o comprimento de correlação, $\xi_{||}$, do perfil original, geram um expoente diferente do esperado para a classe de universalidade KPZ, associado a dinâmica de crescimento descorrelacionada. Um ajuste linear nessa região fornece um *slope* $\beta = 1/2$. Através da análise do ponto de crossover p_c , torna-se viável extrair os valores de bins ou equivalentemente o tamanho da ponta da sonda do AFM no modo não contato, que forneça o expoente de crescimento esperado para a classe de universalidade da equação estocástica KPZ. É válido ressaltar que os bins ótimos encontrados nos casos anteriores estão na região compatível com o expoente de crescimento da classe KPZ. A relação de escala encontrada se

assemelha a de FV, sendo que o expoente ν mostrou-se compatível com o expoente dinâmico, z , da classe KPZ, e o expoente λ possui valor similar ao expoente de rugosidade α .

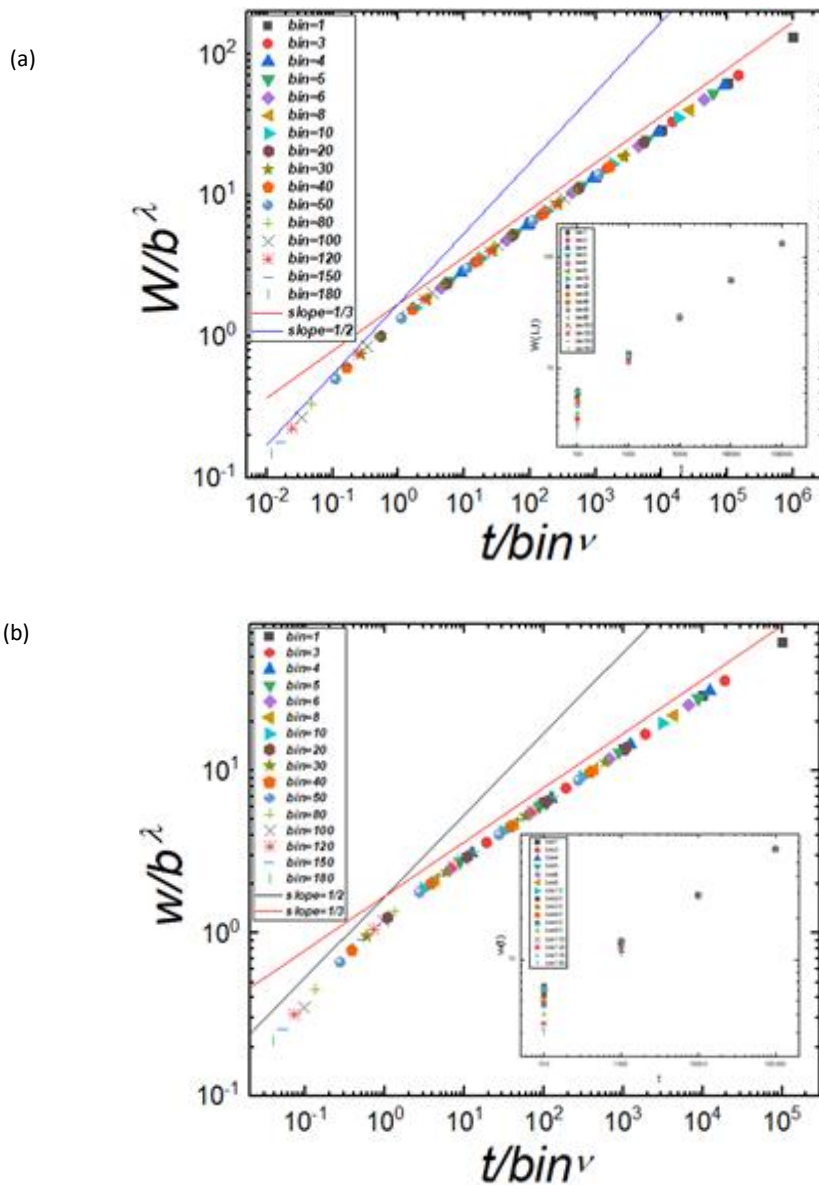


Fig.3.18: (a) Colapso das rugosidades globais para diferentes bins utilizando a técnica TMHP no modo sobreposição, para o modelo de Etching em 1 + 1 dimensões, com tamanho lateral $L = 2^{19}$ e tempo no intervalo $10^2 \leq t \leq 10^6$. O ponto de crossover estimado no eixo horizontal é $p_c \sim 1$, a reta azul indica um $slope = 1/2$, enquanto a vermelha possui $slope = 1/3$. Observa-se que determinados valores de bins imprimem um crescimento descorrelacionado; (b) ilustra a situação análoga para o regime de não sobreposição, percebe-se a similaridade com a situação ilustrada na letra (a). Os expoentes neste regime foram: $\lambda = 0,50$ e $\nu = 1,51$, o expoente de crescimento encontrado na região do bin ótimo $\text{bin}_{opt} = 4$, foi $\beta = 0,332$. O ponto de crossover $p_c \sim 1$, o inset nas letras (a) e (b) representam as rugosidades globais antes do colapso.

O modelo DB possui fortes correções de escala e sua equivalência com a classe KPZ motivou pesquisas. Diante disto, é conveniente aplicar o TMHP ao modelo DB, afim de se analisar os efeitos da técnica na correção do expoente α_{eff} . Os resultados evidenciam que a técnica TMHP além de reduzir as flutuações estocásticas nos vales profundos e estreitos que surgem durante o processo de agregação, também diminui as flutuações de altura nos picos. As flutuações estocásticas de alturas nas regiões de vales são responsáveis pela existência de uma rugosidade intrínseca, w_i , que modifica a relação de escala de FV e são a origem das correções de escala para o modelo DB. Portanto, para este modelo, a técnica TMHP mostrou-se novamente apta a fornecer correções para os expoentes de escala. Por fim, foi confirmado que o expoente de rugosidade local, assim como o expoente de crescimento global, se enquadra na classe de universalidade KPZ.

A técnica TMHP foi utilizada para o modelo DB em perfis com tamanho lateral $L = 2^{19}$ e analisou-se o comportamento dos bins ótimos para diferentes monocamadas, no intervalo $10^2 \leq t \leq 10^6$. Ademais, também foi realizado a análise do TMHP gerado com bins sobrepostos e não sobreposto, e novamente foi averiguado que o bin ótimo se mantém constante para esses dois regimes. Optou-se em operar em largas escalas de tempo e tamanho para minimizar os efeitos de tempo e tamanho finito que estão presentes neste modelo, além de ter sido efetuado 500 médias configuracionais para melhorar a estatística das simulações.

Na Fig.3.19(a), observa-se que $b_{opt} = 6$, diferente do encontrado no modelo de Etching no mesmo tempo e tamanho, mostrando que o b_{opt} não é uma quantidade constante para a classe de universalidade e sim uma quantidade específica para cada modelo, apesar de possuírem valores relativamente próximos. A região hachurada na curva da Fig.3.19(a) indica um platô onde se encontra o expoente $\alpha_{eff} = 0,492(4)$, obtido através da técnica TMHP, enquanto que no perfil original obtém-se $\alpha_{eff} = 0,483(3)$. Na Fig.3.19(a) percebe-se uma diferença na inclinação da curva para os valores iniciais de r que reflete a suavização em pequenas escalas promovida pela técnica TMHP. Este fato também foi observado anteriormente quando se comparou o perfil obtido através de simulação computacional do AFM, com o perfil transformado de alturas médias. A Fig.3.19(d) mostra que a técnica TMHP é capaz de atenuar as flutuações em pequenas escalas nos picos do perfil original, em decorrência disto, gera-se um perfil mais suave, como consta na Fig.3.19(a). A comparação do perfil gerado pela técnica TMHP com o perfil original, mostra que apesar da suavização observada nas regiões de picos e vales, mantêm-se o caráter geométrico das flutuações de altura, possibilitando assim, a obtenção da correção para o *scaling* e conseqüentemente dos expoentes de escala.

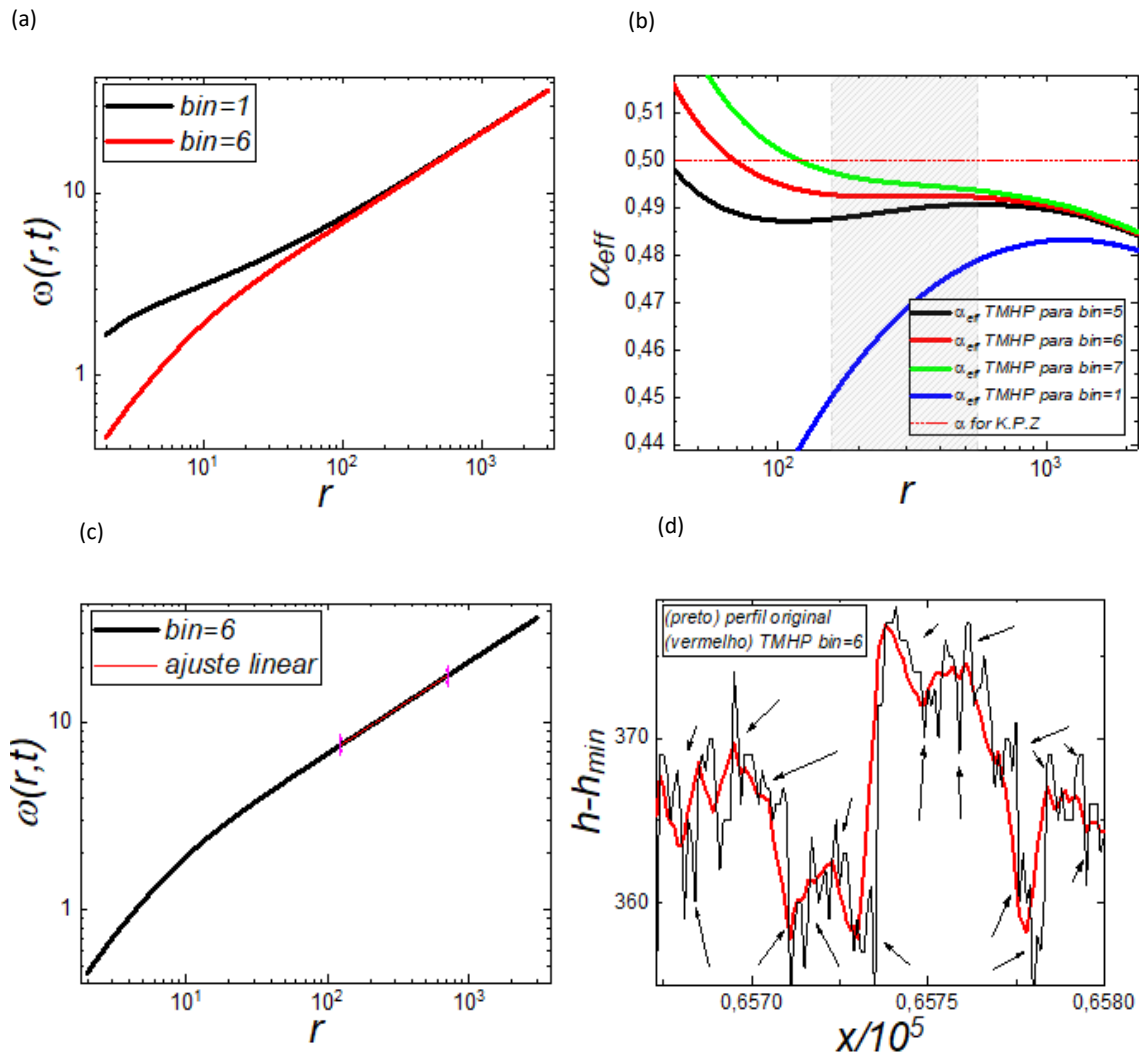


Fig.3.19: (a) comparação entre as curvas de rugosidades locais, $\omega(r, t)$, em função de r , para o perfil gerados pela técnica TMHP com o bin ótimo e o perfil original, no modelo DB em 1+1 dimensões, com $L = 2^{19}$ e $t = 10^6$.; (b) obtenção do expoente de rugosidade local α_{eff} utilizando o TMHP. Existe uma região de platô para a curva vermelha que corresponde ao $b_{opt} = 6$; (c) ajuste linear na região do platô para a rugosidade local do TMHP com $slope = 0,492(4)$, próximo do valor de α_{eff} ; (d) comparação entre o perfil original e o perfil gerado pelo TMHP, com $bin_{opt} = 6$. As setas indicam as flutuações nas regiões de picos e vales que foram reduzidas pela técnica TMHP.

A Fig.3.20(b), mostra que o bin ótimo também se mantém inalterado no regime de não sobreposição. Neste caso, o valor do expoente encontrado é praticamente idêntico ao observado no caso de sobreposição, assim como o tamanho do platô, com $\alpha_{eff} = 0,492(6)$. Contudo, para pequenos tamanhos de bins, o perfil gerado pela técnica TMHP no regime de não sobreposição possui menos semelhanças em relação as flutuações do perfil original, em comparação ao regime de sobreposição. Diante dos resultados expressos para o modelo de

Etching e DB, as simulações reportam que os bins ótimos são os mesmos tanto no regime de sobreposição quanto na não sobreposição. A rigor ambos regimes produzem efeitos semelhantes na correção da escala, haja vista que os expoentes de rugosidade local α_{eff} foram praticamente idênticos, como evidenciado na Fig.3.21, que estabelece a comparação dos regimes para o modelo DB.

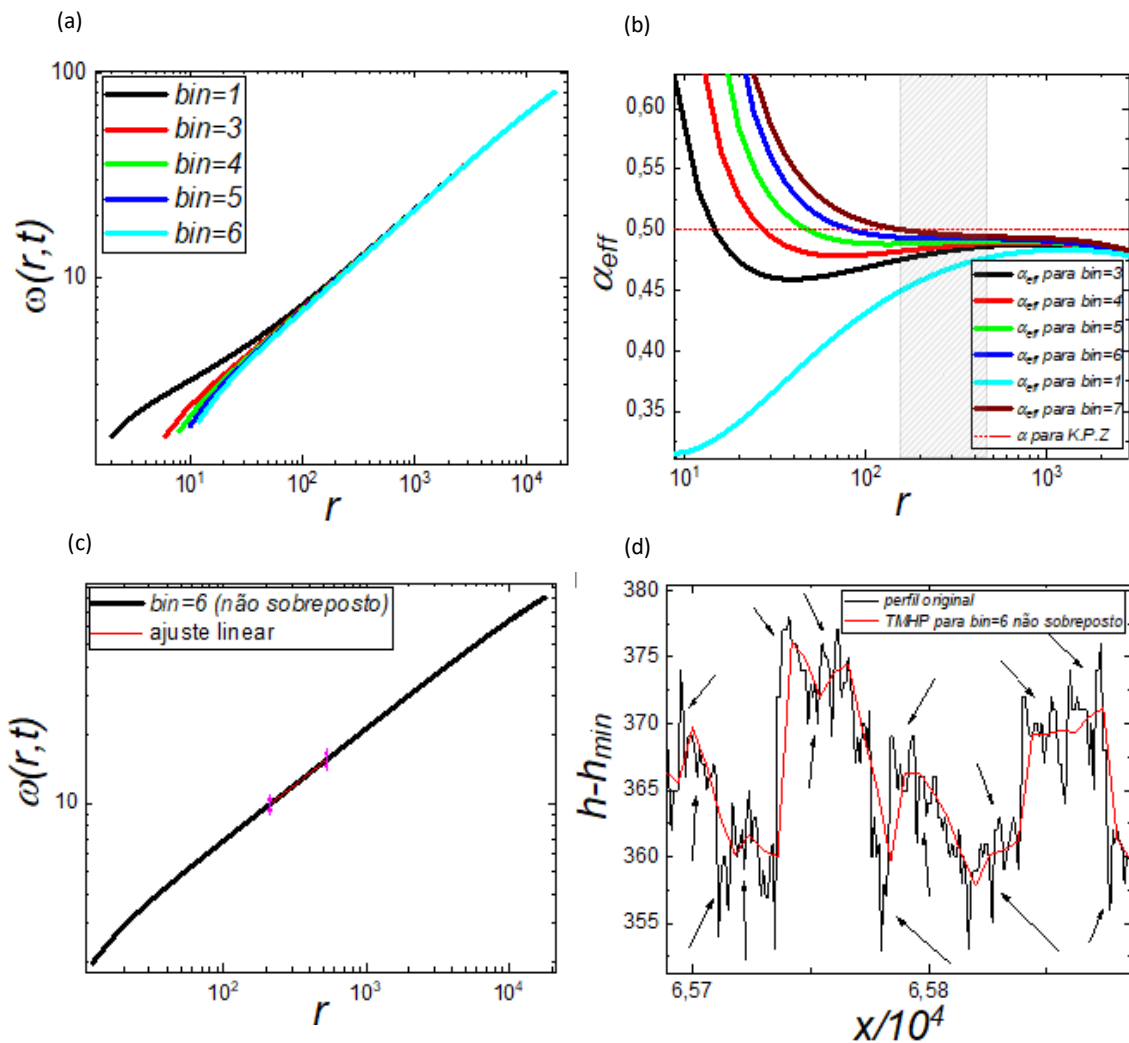


Fig.3.20: (a) curvas de rugosidade local, $\omega(r, t)$, em função de r para o modelo DB em $1 + 1$ dimensões, com tamanho lateral $L = 2^{19}$ e 10^6 monocamadas; (b) curvas do expoente α_{eff} , a região estacionária indica $b_{opt} = 6$ de maneira semelhante ao reportado no caso de sobreposição; (c) ajuste linear no intervalo referente ao platô da letra (b), que fornece um $slope = 0,492(7)$, similar ao expoente reportado; (d) comparação entre o perfil original e o perfil gerado pela técnica TMHP construído a partir do bin ótimo no regime de não sobreposição. As setas indicam as regiões nos vales e picos onde houve o processo de suavização.

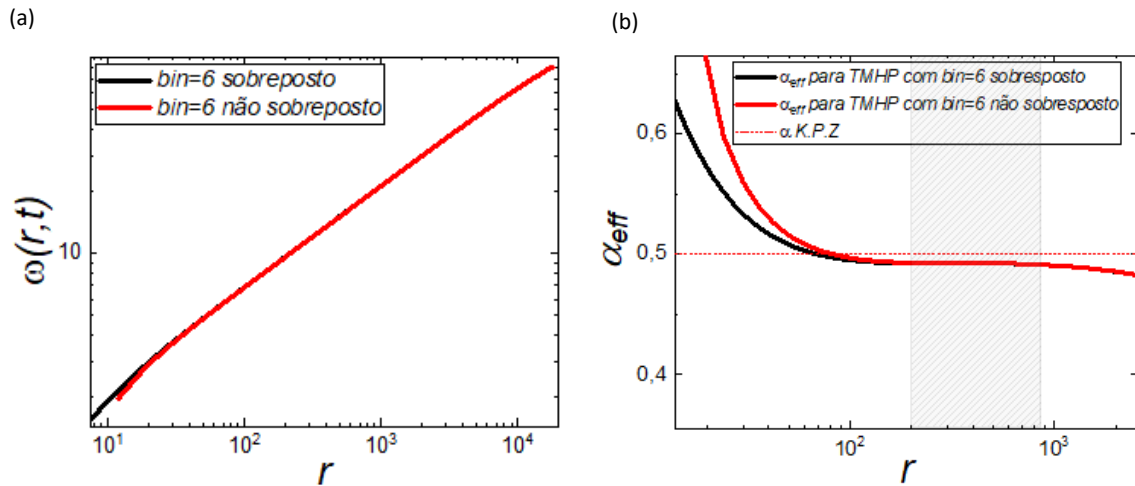
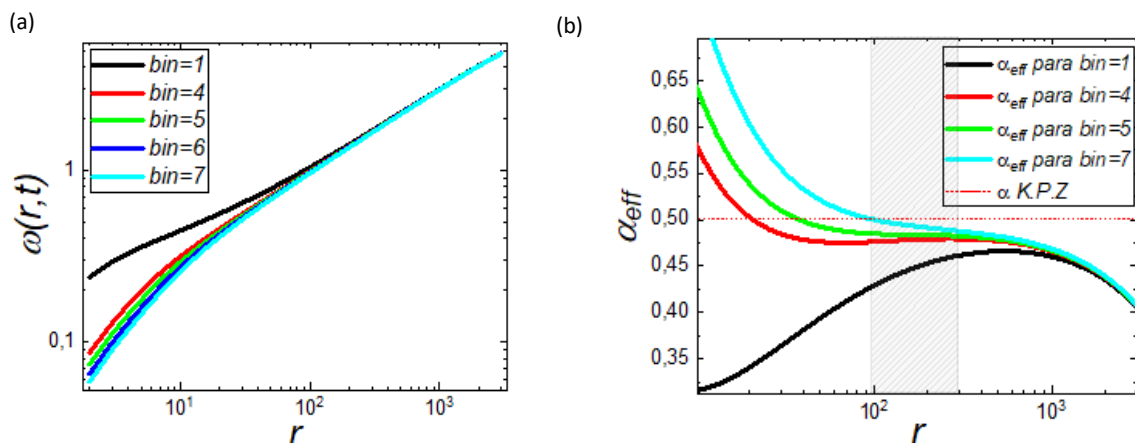


Fig.3.21: (a) comparação entre as curvas de rugosidade local em função de r para o perfil gerado pela técnica TMHP com bin ótimo, no regime de sobreposição e não sobreposição. O gráfico mostra que o perfil produzido pelo TMHP no regime de não sobreposição captura uma quantidade menor de flutuações de altura do perfil original, levando a uma superfície ligeiramente menos rugosa quando comparada com a do TMHP no regime de sobreposição; (b) comparação entre os valores obtidos para o expoente de rugosidade local α_{eff} . Ademais, existe uma semelhança entre as curvas bem como os platôs.

Constatou-se que existe um tempo inicial para aplicação do TMHP no modelo DB, sendo que antes deste tempo não é conveniente a utilização da técnica, uma vez que não irá se observar platô para a obtenção do expoente α_{eff} . Será realizada uma análise da aplicação da técnica TMHP em tempos no intervalo $10^3 \leq t \leq 10^5$. Para tempos menores que 10^5 , o expoente de rugosidade local α_{eff} torna-se cada vez menor, revelando efeito de tempo finito. Os valores dos bins ótimos variam pouco, e a partir de tempos da ordem de 10^2 monocamadas não é possível extrair bin ótimo. Abaixo desse limiar de tempo, para $t \leq 10^2$, encontra-se que o $b_{opt} = 1$ o que equivale ao próprio perfil original, descaracterizando a utilização da técnica TMHP para obtenção do expoente α_{eff} . A Fig.3.22(b) mostra a obtenção do expoente de rugosidade local na região do platô compatível com o $bin_{opt} = 5$, o valor de $\alpha_{eff} = 0,483(4)$. O bin ótimo é uma unidade menor que o observado para o tempo $t = 10^6$.



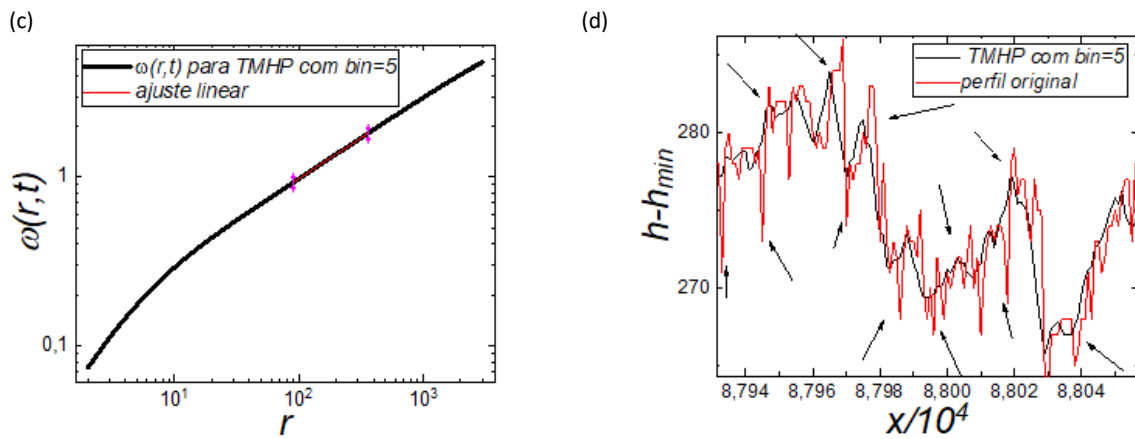
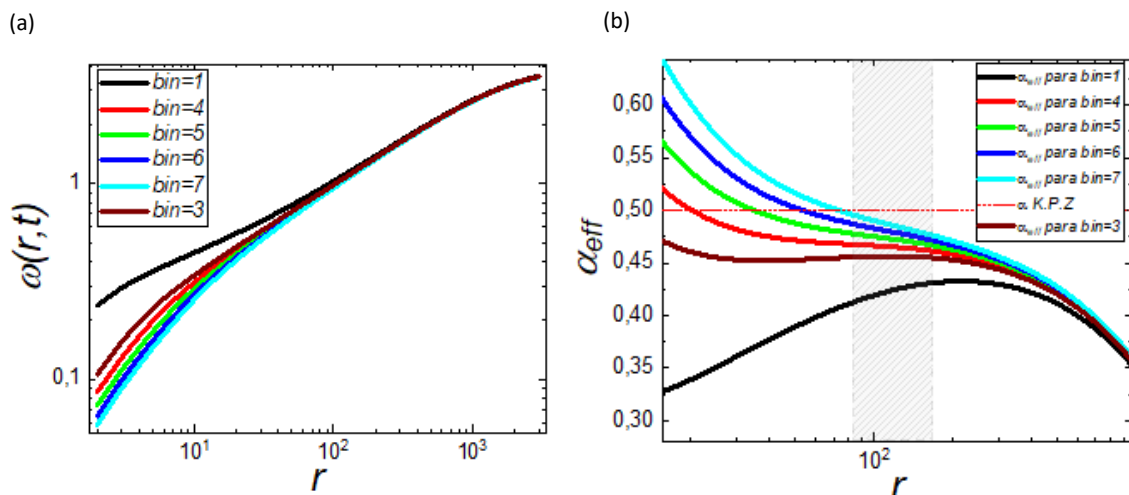


Fig.3.22: (a) comparação entre curvas de rugosidade local, $\omega(r, t)$, em função de r para os perfis gerados pela técnica TMHP com diferentes valores de bins, no modelo DB em $1 + 1$ dimensões, com tamanho lateral $L = 2^{19}$ e $t = 10^5$; (b) comparação entre as curvas do expoente de rugosidade local para diferentes valores de bin; (c) ajuste linear na região do platô da letra (b) com $slope = 0,483(6)$ e coeficiente de correlação $r = 1$; (d) comparação entre o perfil original e o perfil gerado pelo TMHP com bin ótimo no modo de sobreposição. As setas indicam muitas flutuações de altura em pequenas escalas (*i.e.*, perfil muito rugoso), o que explica o expoente α_{eff} ligeiramente menor.

Para os resultados referentes ao tempo $t = 10^4$, como ilustrado na Fig.3.23(b), além de ter se constatado uma queda no valor do expoente de rugosidade local, $\alpha_{eff} = 0,456(2)$ com $b_{opt} = 3$. Observou-se que o valor do bin ótimo não decresceu em uma unidade em relação ao bin ótimo encontrado no tempo $t = 10^5$. Portanto, este não é um comportamento sistemático, muito embora na maioria das vezes decrescer o tempo por um fator de dez, no modelo de Etching e DB, acarretou em uma queda de uma unidade no bin ótimo. Ademais, a principal contribuição das flutuações vem dos locais onde há vales profundos. Dito isto, a técnica TMHP revelou-se uma ferramenta capaz de atenuar as flutuações tanto nas regiões de vales profundos quanto nas regiões de picos, em ambos modelos discretos. Contudo, as correções ocorrem de maneira mais evidente nas regiões de vales quando comparadas com as de picos, como observado na Fig.3.23(d).



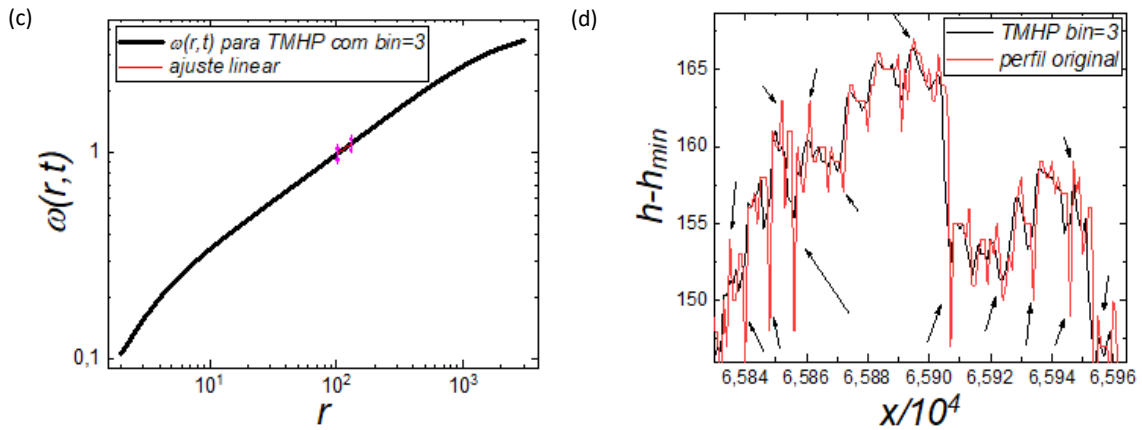
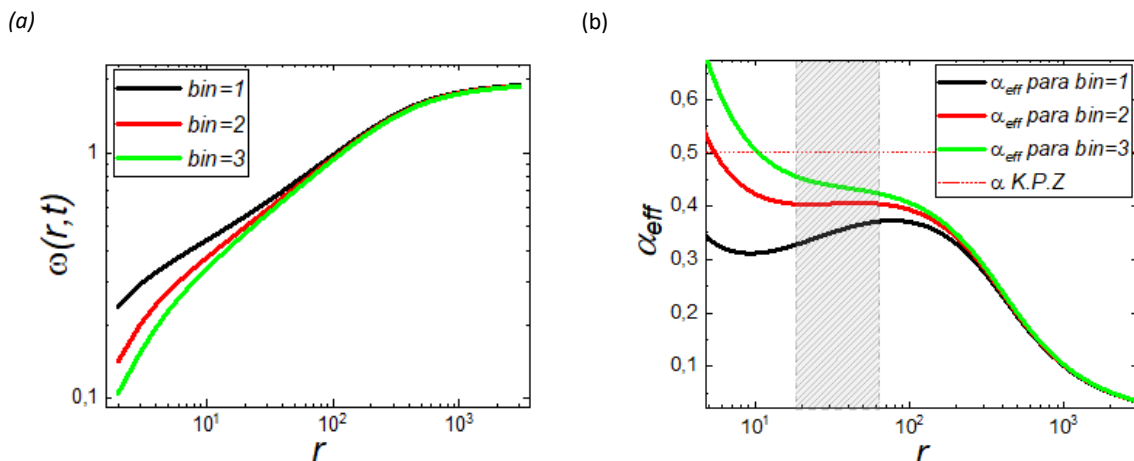


Fig.3.23: (a) comparação entre as curvas de rugosidade local, $\omega(r, t)$ em função de r para os perfis gerados pela técnica TMHP com diferentes bins no modo sobreposição, para o modelo DB em 1 + 1 dimensões com tamanho lateral $L = 2^{19}$ e tempo $t = 10^4$; (b) comparação entre as curvas do expoente de rugosidade local obtidos a partir de diferentes valores de bin; (c) curva de rugosidade local para TMHP com $b_{opt} = 3$. O ajuste linear na região de platô fornece um $slope = 0,456(2)$, em acordo com o expoente anteriormente reportado; (d) comparação entre o perfil original e o perfil gerado pelo TMHP construído a partir do bin ótimo. As setas indicam regiões de vales e picos que foram suavizadas pelo TMHP.

As Fig.3.24(a-d) mostram os resultados para o último intervalo de tempo no modelo DB em que a técnica TMHP se fez útil para a correção do expoente de rugosidade local. Na Fig.3.24(b) mostra que o perfil gerado pelo TMHP com $b_{opt} = 2$ que fornece $\alpha_{eff} = 0,405(5)$. Os resultados referentes a aplicação do TMHP para obtenção do expoente α_{eff} , no modo de não sobreposição em todos os intervalos de tempo analisados foram similares. Uma análise do expoente efetivo de rugosidade local reporta efeito de tempo finito, pois obtém-se um expoente com valor abaixo do esperado para a classe KPZ, mesmo através da correção advinda do TMHP. A Fig.3.24(d) sinaliza que existe uma maior correspondência do perfil gerado pela técnica TMHP com o perfil original, já que o bin ótimo é pequeno e captura grande parte das flutuações locais, em detrimento disto, as correções promovidas pelo TMHP serão menores que as observadas para bins maiores.



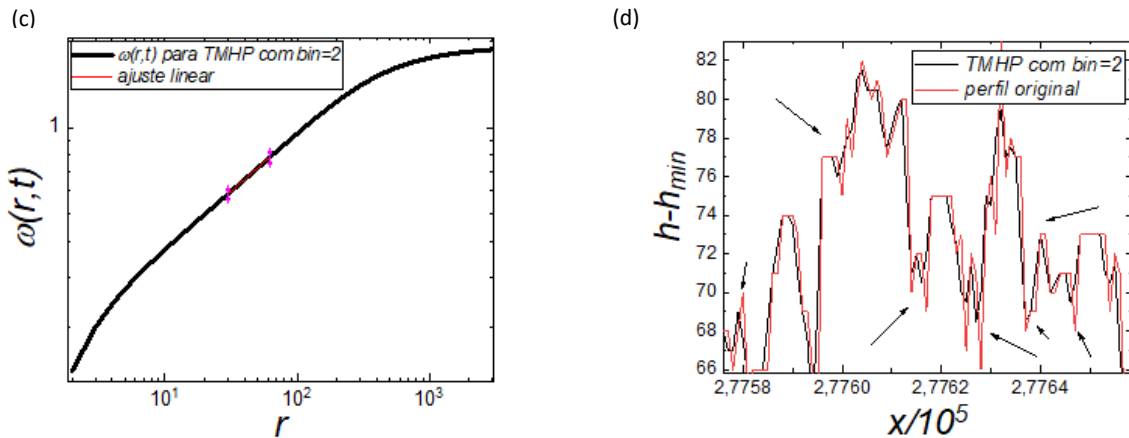


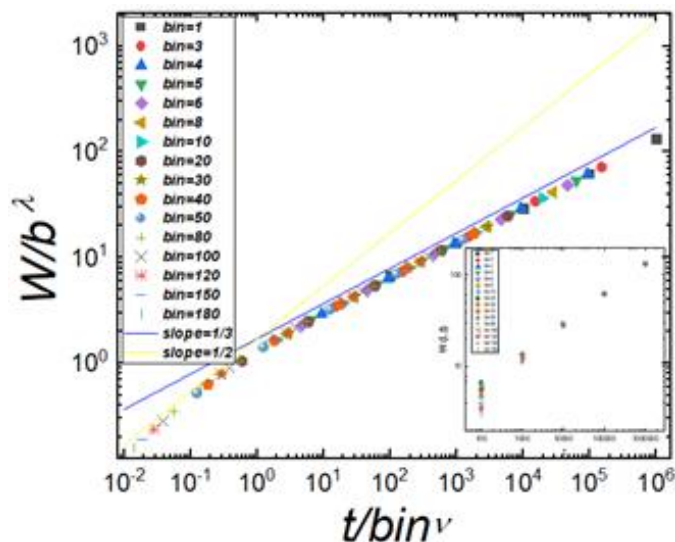
Fig.3.24: (a) curvas de rugosidade local em função de r para perfis gerados pela técnica TMHP com diferentes valores de bins para o modelo DB, com $L = 2^{19}$ e $t = 10^3$; (b) comparação entre os expoentes de rugosidade local para diferentes tamanhos de bin; (c) curva da rugosidade local em função de r do perfil gerado pelo TMHP construído a partir do b_{opt} , a reta vermelha indica a região correspondente ao platô da letra (b), em que foi efetuado um ajuste linear, obtendo-se com um $slope = 0,405(4)$; (d) comparação entre o perfil original e o TMHP construído a partir do bin ótimo, observa-se uma semelhança entre os perfis devido a utilização de um bin pequeno. As setas indicam regiões onde houve suavização nas flutuações de altura.

Os resultados anteriores mostraram uma comparação entre o perfil gerado pela técnica TMHP e o perfil original, em todos os casos constatou-se que o TMHP reduz as flutuações estocásticas em duas regiões distintas (vide indicação das setas nas regiões de vales e picos). Este mecanismo de suavização possui diferentes implicações relacionadas as correções promovidas pelo TMHP, bem como em sua conexão com a simulação computacional para o AFM. As reduções das flutuações estocásticas de altura que ocorrem nas regiões de vales profundos, são responsáveis por minimizar o efeito da rugosidade intrínseca, e, portanto, corrigir a escala. Ao comparar o efeito promovido pelo TMHP sobre o perfil original dos modelos de Etching e DB, percebe-se que as flutuações nos vales profundos e estreitos para o modelo DB são mais apreciáveis que as do modelo de Etching, por este motivo observar-seão fortes correções de escala no modelo DB.

Também foi efetuado o cálculo da rugosidade global para perfis gerados pela técnica TMHP com diferentes valores de bins para o modelo DB. Observou-se que os pontos ficam desalinhados, o que evidencia a possibilidade de efetuar uma escala para os dados, conforme exposto no inset das Fig.3.25(a-b). Para tal, buscou-se expoentes que fornecessem o melhor colapso dos pontos, através da relação de escala dada pela equação 3.5. O valor do expoente que fornece o colapso na vertical foi $\lambda = 0,56$, e o da horizontal foi $\nu = 1,71$, para o regime de sobreposição. No regime de não sobreposição os resultados dos expoentes foram $\lambda = 0,6$, e $\nu = 1,82$. A escala dos dados revela a existência de dois regimes assintóticos distintos, delimitados pela presença de um ponto de crossover p_c . O ponto de crossover revelou-se próximo para o modelo de Etching e DB, contudo,

não é possível afirmar que ele seja uma constante para todos os modelos discreto ditos pertencentes à classe KPZ. Para alguns valores de bins, observa-se que o expoente de crescimento é compatível com sistemas onde ocorre crescimento descorrelacionado, haja vista que o tamanho do bin supera o comprimento de correlação. Enquanto que outros valores de bins são capazes de fornecer o expoente de crescimento compatível com o da classe de universalidade KPZ. Através dessa relação de escala, e conhecendo a correlação existente entre o perfil gerado pela técnica TMHP e o perfil obtido através de simulação computacional do AFM, há a possibilidade de se estimar o comprimento da ponta da sonda do AFM no modo não contato (o que equivale a determinar o valor do bin), capaz de fornecer o expoente de crescimento condizente com o da classe KPZ. Diante disto, a técnica TMHP se mostrou uma ferramenta que auxilia tanto na correção da escala, quanto para fornecer informações relacionados a medições envolvendo a morfologia alcançada através de simulação computacional que busca representar o AFM, em sistemas pertencentes a classe KPZ.

(a)



(b)

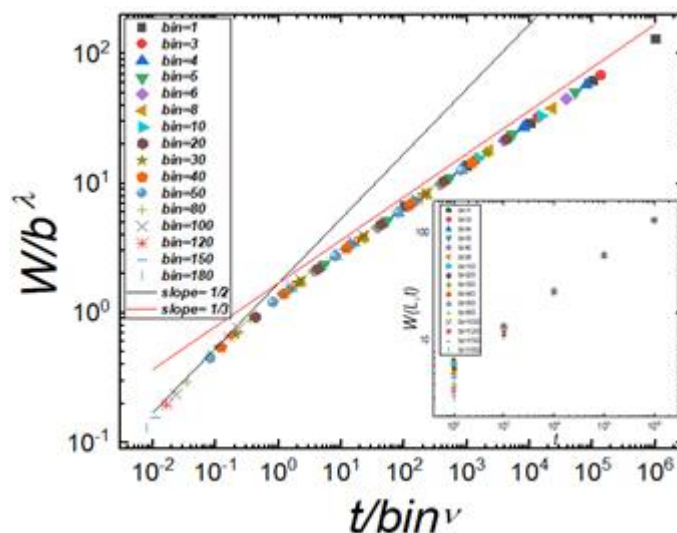


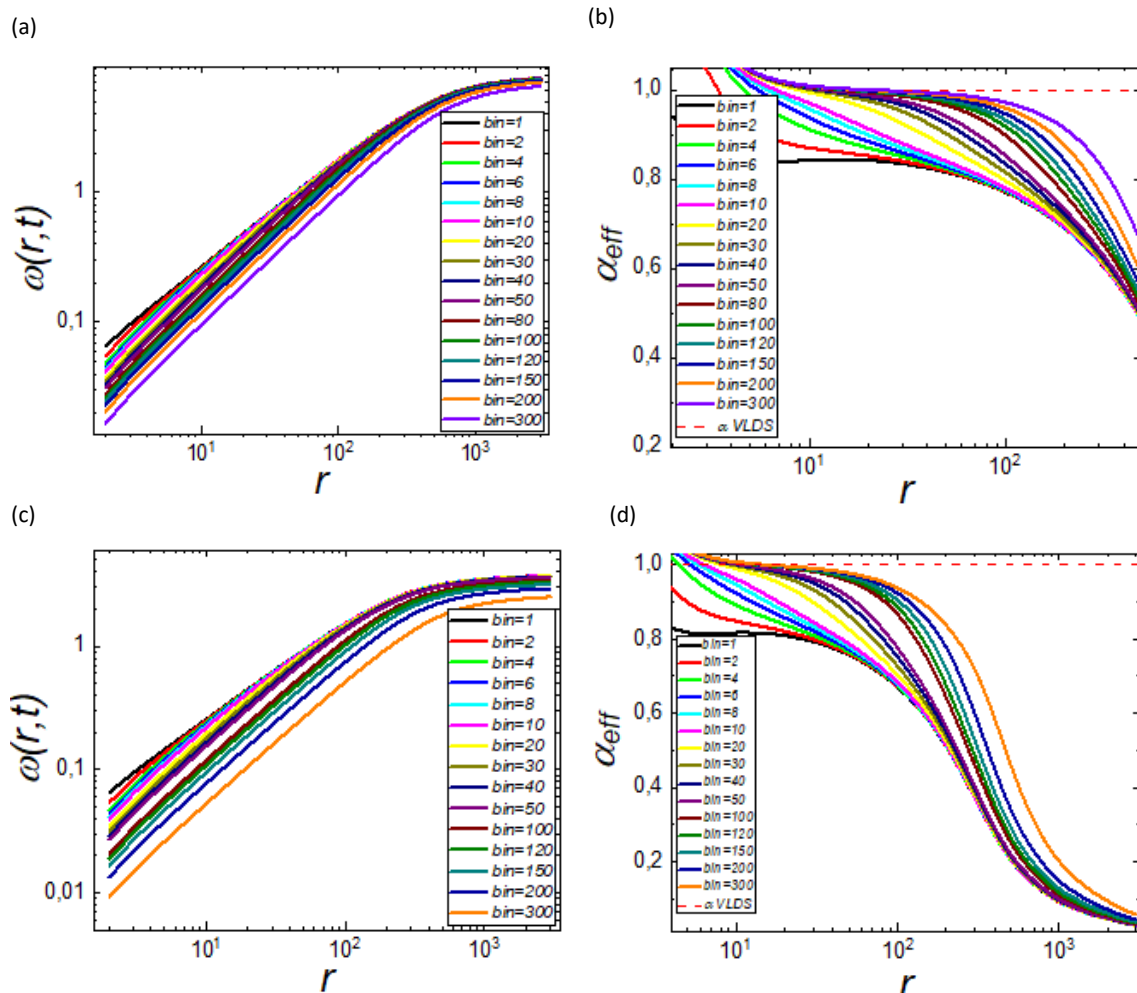
Fig.3.25: (a) Colapso da rugosidade global, W , para os perfis gerados pela técnica TMHP com diferentes valores de bins no modo de sobreposição, para o modelo DB em 1 + 1 dimensões, com tamanho lateral $L = 2^{19}$ e tempo no intervalo $10^2 \leq t \leq 10^6$, com $NRI = 500$. Nota-se um ponto de crossover no eixo horizontal, p_c , que divide os dados em dois regimes distintos, sua estimativa fornece $p_c \sim 1$. (b) representação análoga a letra (a), com mesmos valores de bins, contudo, no regime de não sobreposição. A estimativa do ponto de crossover fornece $p_c \sim 1$, valor próximo ao registrado no caso da sobreposição de bins. Os insets representam o conjunto de dados antes do processo de colapso.

3.5 Aplicação da técnica TMHP para o modelo de rede CRSOS

Na seção anterior aplicou-se a técnica TMHP em modelos pertencentes à classe KPZ, contudo, é necessário compreender os efeitos da técnica em modelos pertencentes a outras classes de universalidade, para que seja possível averiguar seu limite de aplicabilidade. A classe escolhida foi a VLDS devido a sua ligação com o processo de epitaxia por feixe molecular, técnica utilizada para fabricação de filmes finos de alta qualidade. Além disso, constatou-se uma carência de resultados na literatura que reportam expoentes da classe VLDS em medidas de AFM. Uma vez que o perfil gerado pela técnica TMHP se assemelha ao perfil obtido através de simulação computacional da microscopia de força eletrostática, é possível utilizá-lo como ferramenta de investigação. A semelhança significa dizer que a geometria das flutuações é preservada e a técnica TMHP age no sentido de reduzir tais flutuações, isto não prejudica o *scaling*. Contudo, a aplicação da técnica TMHP para o modelo CRSOS, dito pertencente à classe VLDS, revelou algumas limitações. As análises indicam que não é possível determinar simultaneamente os expoentes de escala, uma vez que a obtenção do expoente α_{eff} compromete a determinação do expoente β .

Como exposto na Fig.3.26(b,d), a utilização da técnica TMHP para obtenção de correções do expoente de rugosidade local, evidencia que o tamanho do bin que pode fornecer a melhor correção possui um valor alto, diferente do observado para os modelos pertencentes a classe KPZ. Em razão disto, quando o perfil original é transformado a partir de médias realizadas em grandes tamanhos de bins, o perfil gerado possui grandes comprimentos de onda que não conseguem capturar as flutuações em pequenas escalas. Como consequência direta observa-se estruturas semelhantes a grãos, que se estendem pela superfície [112], gerando padrões diferentes das estruturas

existentes no perfil original. Nas Fig.3.26(e,f) observa-se que perfil gerado pela técnica TMHP deforma o perfil original, tornando-se consideravelmente mais suave, e as estruturas de grãos não mantem o caráter geométrico das flutuações de altura do perfil original. Como exposto nas Fig.26(a,c), nos regimes de sobreposição e não sobreposição, respectivamente, a rugosidade local dos perfis gerados pelo TMHP, com bins suficientemente grandes, difere da rugosidade do perfil original. As Fig.3.26(b,d) mostram os valores obtidos para o expoente α_{eff} , utilizando a técnica TMHP no tempo $t = 10^6$ para o $bin = 300$ onde encontra-se uma região com platô que fornece $\alpha_{eff} = 0,998(5)$, em concordância com a classe VLDS. Enquanto que para o perfil original o valor encontrado foi $\alpha_{eff} = 0,817(2)$. No tempo de $t = 10^5$ o expoente reportado foi $\alpha_{eff} = 0,998(8)$. Portanto, a correção promovida pelo TMHP para o expoente α_{eff} , exibida nas Fig.3.26(b,c), reflete a geometria dos grãos e não advém da redução das flutuações estocásticas de alturas. Sendo, portanto, uma coincidência que o valor de α_{eff} reportado através da utilização da técnica TMHP seja similar ao expoente da classe VLDS. Pois estruturas muito suavizadas podem gerar expoentes α_{eff} com valores elevados, próximos a um. Este resultado impõe a primeira limitação da técnica TMHP na correção dos expoentes de escala em modelos pertencentes à classe VLDS. No entanto, algumas formas de grãos podem acarretar em expoentes diferentes dos obtidos a partir da aplicação a técnica TMHP, em modelos pertencentes a classe VLDS, conforme discutido na referência [112].



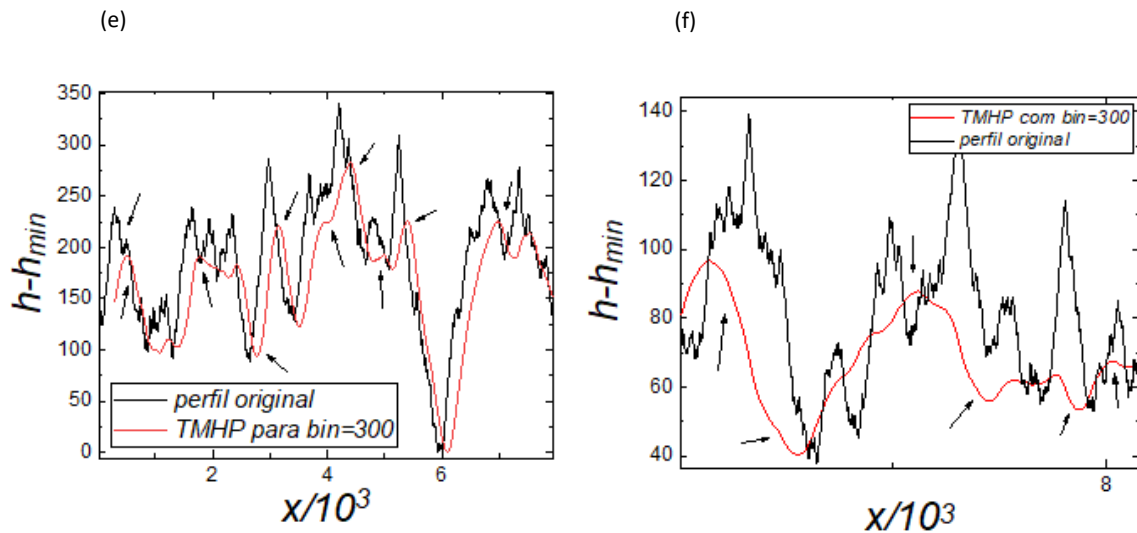


Fig.3.26: (a) e (c) ilustram as curvas de rugosidade local, $\omega(r, t)$, em função de r para os perfis gerados pela técnica TMHP a partir de diferentes tamanhos de bins, para o tempo $t = 10^6$ e $t = 10^5$, respectivamente, no modelo CRSOS com tamanho lateral $L = 2^{14}$ e $NRI = 500$; (b) e (d) mostram uma comparação entre as curvas do expoente de rugosidade local para diferentes valores de bins. (e) e (f) estabelecem uma comparação entre o perfil original e o perfil gerado pela técnica TMHP com $bin = 300$. As setas sinalizam as regiões onde o TMHP substitui a geometria das flutuações por estruturas compatíveis com grãos. Como consequência, gera-se um perfil muito suave com grande comprimento de onda, que consequentemente produz um expoente α_{eff} com valor similar ao da classe VLDS.

Na Fig.3.27, realizaram-se as escala da rugosidade e do tempo sugeridas pela equação (3.5), onde os expoentes λ e ν são aqueles que proporcionam o melhor colapso dos dados para diferentes tamanhos de bins. Os expoentes de colapso obtidos foram $\lambda = 1,22$ e $\nu = 3,79$, no regime de sobreposição. Observa-se a existência de um ponto de crossover p_c que divide o sistema em dois regimes assintóticos distintos. O problema relacionado à classe VLDS no que concerne a utilização do TMHP, é que os valores de bins capazes de corrigir o expoente de rugosidade local α_{eff} , possuem tamanho tal que superam o comprimento de correlação. Sendo assim, o perfil gerado pelo TMHP cresce de maneira descorrelacionada. Então existe uma incongruência, pois os tamanhos de bins capazes de fornecer correções para o expoente α_{eff} prejudicam a obtenção do expoente de crescimento compatível com à classe VLDS. Portanto, pode-se utilizar essa constatação relacionada a técnica TMHP para supor a existência de uma limitação na utilização de simulações computacionais para o AFM no modo não contato em medições de perfis pertencentes a classe VLDS. Essa limitação está relacionada a ponta da sonda, uma vez que o tamanho do raio da ponta na simulação do AFM necessário para obter o expoente α_{eff} pode comprometer a determinação do expoente β , acusando um valor relacionado a uma dinâmica descorrelacionada na interface, $\beta = 1/2$.

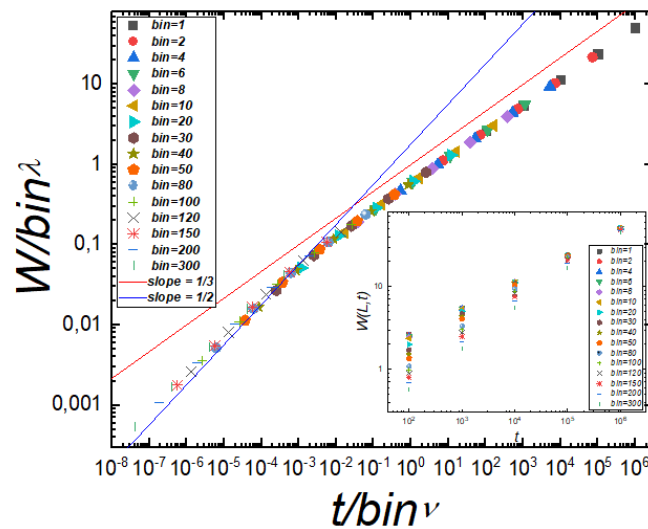


Fig.3.27: gráfico do colapso da rugosidade global dos perfis gerados através da técnica TMHP com diferentes valores de bins para o modelo CRSOS, com tamanho lateral $L = 2^{15}$ no intervalo de tempo $10^2 \leq t \leq 10^6$. Observa-se um ponto de crossover que divide o conjunto de dados em duas regiões com *slopes* distintos. O *slope* = 1/2 é compatível com um crescimento descorrelacionado, portanto, existe alguns valores de bins que geram perfis descorrelacionados. Este gráfico expõe que o bin compatível com a correção para o expoente de rugosidade local, visto na Fig.3.27, está na região coadunável com $\beta = 1/2$. O valor estimado para o ponto de crossover no eixo horizontal é $p_c = 0,0296$. A estimativa para p_c é realizada a partir da obtenção do ponto de intercepção das retas do ajuste linear nas duas regiões com *slopes* diferentes. O *inset* mostra o conjunto de pontos referentes a rugosidade global para diferentes valores de bins antes do processo de colapso.

Embora a técnica TMHP não tenha se mostrado eficaz para obtenção do expoente α_{eff} em modelos pertencentes a classe VLDS, existem outras ferramentas capazes de fazê-lo, a citar a análise de flutuações destendenciadas (*detrended fluctuation analysis*-DFA) [113] e a análise ótima de flutuações destendenciadas (*optimal detrended fluctuation analysis*-ODFA) [55,88]. Sendo que o ODFA se mostrou capaz de obter melhores correções para o expoente de rugosidade local quando comparado com o DFA. O ODFA se baseia na análise de flutuações das alturas, calculando a menor distância em cada ponto do perfil com uma curva gerada através de um fit de um polinômio de grau n . Com isto é possível reduzir a tendência gerada pelas estruturas de morros que surgem a partir de processos difusivos na superfície de sistemas pertencentes à classe nMBE.

Capítulo 4:

Conclusões

Neste trabalho, introduziu-se a técnica do TMHP (*Transformed Mean Height Profile*), que consiste na utilização de um perfil transformado de alturas médias como ferramenta para obtenção de correções de escala. A técnica se baseia na divisão da superfície em bins [33], de modo que em cada uma das janelas é calculado o valor médio das alturas, obtendo-se um perfil transformado. A técnica foi aplicada em modelos de rede pertencentes as classes KPZ e VLDS. Ademais, a partir de resultados de simulação computacional que representam qualitativamente a microscopia de força eletrostática, no modo não-contato e a força constante, constatou-se a existência de uma equivalência entre o perfil gerado pela varredura e o perfil produzido pela técnica TMHP [37]. Essa correspondência foi reforçada através do cálculo de algumas quantidades estatísticas de interesse, como a rugosidade local [53] e a função de autocorrelação altura-altura.

Foi exposto que para o caso da classe de universalidade KPZ um dos motivos para a existência de fortes correções de escala reside na existência de uma rugosidade intrínseca w_t^2 [114]. Este termo modifica a relação de escala FV, sendo caracterizado por flutuações estocásticas de altura nos vales profundos e estreitos [33]. Através da comparação entre os perfis gerados pela técnica TMHP e os perfis originais dos modelos de rede, mostrou-se que o TMHP consegue reduzir as flutuações estocásticas de alturas presentes nas regiões de vales. Este mecanismo de redução das flutuações promovido pelo TMHP é responsável por implementar correções na escala, que se reflete na obtenção de expoentes de escala em acordo com o esperado para a classe de universalidade da equação KPZ. É válido ressaltar que houve uma análise da técnica TMHP no regime de sobreposição e não sobreposição de bins. Os resultados obtidos para os expoentes de rugosidade local em ambos regimes se mostraram próximos, além de estarem em acordo aos esperados para a classe KPZ.

Uma das características observadas na técnica TMHP é a existência de um bin ótimo, b_{opt} , que consiste em um tamanho de bin capaz de fornecer uma melhor correção para o expoente de rugosidade local α_{eff} . Como discutido no capítulo 3, seção 1, no limite hidrodinâmico o b_{opt} permanece invariante, mas exibe dependência temporal para tempos suficientemente pequenos (efeito de tempo finito). Ademais, os resultados forneceram detalhes acerca de um limiar temporal para aplicação do TMHP. Para tempos menores que 10^3 no modelo DB, e 10^4 no modelo de Etching, a técnica perde a aplicabilidade pois não se observou bin ótimo.

Ademais, a técnica TMHP preserva o expoente dinâmico z e o expoente de crescimento global β , em acordo com os previstos para a classe de universalidade KPZ. No entanto, os resultados mostraram que para bins maiores que o comprimento de correlação o perfil gerado pela técnica TMHP cresce de maneira descorrelacionada e produz um expoente de crescimento $\beta = 1/2$. Contudo, existe um intervalo de bins que geram perfis compatíveis com o expoente $\beta = 1/3$, em acordo com a classe KPZ. Para a melhor compreensão deste comportamento foi efetuado cálculos de rugosidade global, $W(b, t)$, para perfis gerados pelo TMHP com diferentes valores de bins e realizou-se uma escala dos dados para o colapso. Para tal, executou-se o cálculo de expoentes de colapso para o eixo vertical λ e horizontal ν . Surge então, através deste colapso, uma relação de escala da forma $W \sim b^\lambda f(tb^{-\nu})$. Observou-se a existência de dois regimes assintóticos distintos delimitados por um ponto de crossover, p_c , que para o modelo de Etching e DB revelou possuir valores praticamente idênticos, com $p_c \approx 1$. Ademais, constatou-se que os expoentes λ e ν estão relacionados com os expoentes de rugosidade global e dinâmico, respectivamente.

Outro aspecto abordado neste trabalho envolvendo a técnica TMHP é a sua suposta correlação com as simulações computacionais para a microscopia de força eletrostática [106], um tipo específico de AFM no modo não contato. Mostrou-se através da análise da rugosidade local, $\omega(r, t)$, que essa correlação é melhor verificada em grandes escalas. Em pequenas escalas observou-se que devido ao efeito de suavização promovido pelo próprio AFM, o perfil gerado pela simulação do AFM possui grande comprimento de onda que não captura as flutuações em pequenas escalas. Portanto, o TMHP pode ser útil como uma ferramenta de correção do *scaling* do perfil medido pela microscopia de força eletrostática. Como consequência da semelhança entre o perfil medido a partir de simulação pelo AFM no modo não contato e o perfil gerado pelo TMHP, foi suposto que o efeito de suavização promovido pela leitura do AFM é decorrente da redução das flutuações de altura nas regiões de picos.

Nesta dissertação também foi estudado o efeito da aplicação da técnica TMHP no modelo CRSOS, pertencente a classe de universalidade VLDS. Os resultados revelaram que os tamanhos de bins capazes de fornecer uma correção para o expoente de rugosidade local, produzem perfis muito suaves, com geometria de grãos [112], com grande comprimento de onda que não captura as flutuações em pequenas escalas do perfil original. Além disto, percebe-se que não existe uma correspondência satisfatória entre o perfil original e o perfil gerado pelo TMHP. Portanto, o expoente α_{eff} obtido através da técnica possui valor similar ao esperado para classe VLDS, mas essa constatação advém do efeito de suavização do perfil gerado pela técnica TMHP. Haja vista que o expoente α_{eff} gerado por estruturas muito suaves pode possuir valor próximo ao da classe, mas não reflete a geometria das flutuações de alturas. Ademais, também se constatou que o tamanho de bin capaz de fornecer uma correção para o expoente α_{eff} , em contrapartida compromete a obtenção do expoente β , pois o bin possui um tamanho maior que o comprimento de

correlação do perfil original. Em razão disto, o perfil gerado pela técnica TMHP será descorrelacionado gerando um expoente $\beta = 1/2$, similar ao observado no modelo de deposição aleatória. Portanto, a técnica TMHP revelou ser limitada para aplicação em modelos discretos pertencentes à classe VLDS, uma vez que não é possível obter simultaneamente os expoentes de escala compatíveis com o esperado para a classe.

Através da relação de escala definida pelo colapso (3.5), e da suposta correspondência entre o perfil gerado pela técnica TMHP e a morfologia alcançada pela simulação computacional da microscopia de força eletrostática, é possível estimar o comprimento da ponta da sonda (*i.e.*, determinar o valor do bin), que seja capaz de preservar o expoente de crescimento compatível com à classe KPZ. Nas tabelas a seguir, expõe-se os resultados da aplicação da técnica TMHP para obtenção de correções do expoente α_{eff} , bem como dos bin ótimos para cada tempo analisado. No modelo de Etching encontrou-se um expoente com 1,8% de diferença em relação ao da classe KPZ, enquanto que para o modelo DB a diferença foi de 1,6% (ambos no tempo $t = 10^6$, tamanho lateral $L = 2^{19}$, com TMHP no regime de sobreposição). Conforme exposto na tabela 3, os resultados obtidos para o modelo DB estão em acordo com os reportados na referência [83], onde utilizou-se simulações em largas escalas, e os expoentes efetivos obtidos foram similares. Como perspectivas de trabalhos futuros, ressalta-se a necessidade de averiguar a aplicação da técnica TMHP em modelos discretos pertencentes a outras classes de universalidades. Além disto, é conveniente ampliar a aplicação da técnica para 2 + 1 dimensões, que corresponde aos casos de maior interesse tecnológico. Outro aspecto de interesse é a investigação da correlação existente entre o AFM no modo não contato e a técnica TMHP em 2 + 1 dimensões, além de ampliar essa análise para outros modelos discretos, e observar o comportamento dessa correlação em outras classes de universalidades. Ademais, outro ponto de interesse seria a investigação da influência de outras geometrias de ponta nesta correlação.

Tabela 1: comparação entre os expoentes α_{eff} , para a técnica TMHP considerando o bin ótimo e perfil original, no modelo de Etching, com tamanho lateral $L = 2^{19}$ em 1 + 1 dimensões.

t	b_{opt}	$\alpha_{eff} (TMHP)$	$\alpha_{eff} (perfil\ original)$
10^6	4	0,491(1)	0,488(6)
10^5	3	0,482(1)	0,476(2)
10^4	2	0,466(8)	0,45(7)

Tabela 2: comparação entre os expoentes α_{eff} , para a técnica TMHP considerando o bin ótimo e perfil original, no modelo de Etching, no tempo $t = 10^6$ em 1 + 1 dimensões.

L	b_{opt}	$\alpha_{eff} (TMHP)$	$\alpha_{eff} (perfil\ original)$
2^{18}	4	0,498(9)	0,485(5)
2^{17}	4	0,490(2)	0,488(9)

Tabela 3: comparação entre os expoentes α_{eff} , para a técnica TMHP considerando o bin ótimo e perfil original, para o modelo DB, com tamanho lateral $L = 2^{19}$ em 1 + 1 dimensões.

t	b_{opt}	$\alpha_{eff} (TMHP)$	$\alpha_{eff} (perfil\ original)$
10^6	6	0,492(4)	0,483(3)
10^5	5	0,483(4)	0,466(6)
10^4	3	0,456(2)	0,432(4)
10^3	2	0,405(5)	0,372(7)

Apêndice

Na Fig.A.1, é exibida uma comparação entre a técnica TMHP e o perfil transformado de alturas máximas, baseado na técnica do bin, revelando que o TMHP possui maior semelhança com o perfil original. Uma possível explicação para esta constatação advém da própria construção do perfil gerado pelo TMHP, uma vez que o cálculo das médias leva em consideração a contribuição de todas as alturas dentro do bin, ao passo que o perfil de alturas máximas considera apenas a altura máxima de cada bin. Outra diferença entre as técnicas reside na presença de estruturas de terraços com quinas, que é observada apenas na técnica do bin. Estas estruturas podem comprometer o *sclaing*, haja vista que modifica as flutuações locais de altura de maneira mais significativa que a promovida pelo TMHP, o que pode eventualmente prejudicar a obtenção do expoente de rugosidade local. Ambos métodos reduzem as flutuações estocásticas nas regiões de vales, contudo, esse efeito é mais perceptível no método do bin, em contrapartida as flutuações de altura nas regiões de picos são mais suavizadas na técnica TMHP. Vale ressaltar, que essa análise foi realizada no regime de sobreposição de bins.

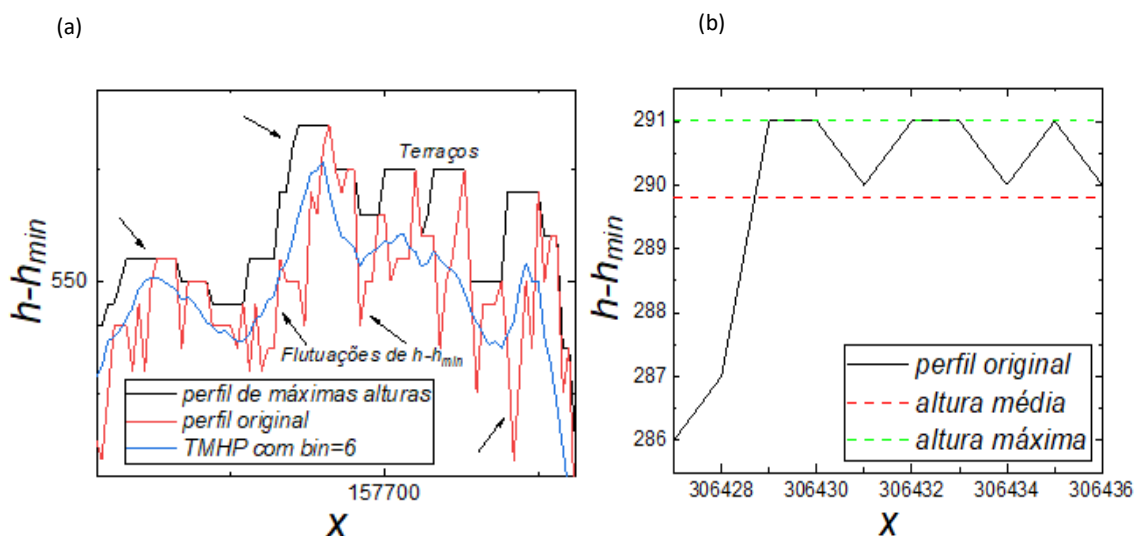


Fig.A.1: (a) comparação entre o perfil original, o perfil gerado pela técnica TMHP e o perfil da técnica do bin, para o modelo DB em $1 + 1$ dimensões, com $L = 2^{19}$ e $t = 10^6$. As setas indicam as regiões de terraços que surgem na técnica do bin. Percebe-se que o perfil gerado pelo TMHP possui maior semelhança com o perfil original. Para ambos métodos se observa a redução de flutuações nas regiões de vales. Ademais, a técnica TMHP também promove uma suavização nas regiões de picos; (b) comparação entre as técnicas para um $b = 10$.

Referências

1. HENINI, M. **Molecular Beam Epitaxy From Research to Mass Production**. 1. ed. [S.l.]: Elsevier Science, v. 1, 2013.
2. JOYCE, B. A. et al. In Situ Studies of Epitaxial Silicon Growth by Gas Source Molecular Beam Epitaxy. **ADVANCED MATERIALS FOR OPTICS AND ELECTRONICS**, v. 7, p. 215-224, 1997.
3. OHRING, M. **Materials Science of Thin Films**. 2. ed. [S.l.]: Academic Press, 2001.
4. VENABLES, J. A. **Introduction to Surface and Thin Film Processes**. 1. ed. [S.l.]: Cambridge University, 2000.
5. M. MIRANDA, ; L. MENEZES-SOBRINHO, I.; , M. S. C. Spontaneous Imbibition Experiment in Newspaper Sheets. **Physical Review Letters**, v. 104, 2010.
6. MEAKIN, P. A New Model for Biological Pattern Formation. **J. theor. Biol.**, v. 118, p. 101-113, 1986.
7. FUJIKAWA, H.; MATSUSHITA, M. Fractal Growth of *Bacillus subtilis* on Agar Plates. **J. Phys. Soc. Jpn.**, v. 58, p. 3875-3878, 1989.
8. MATSUSHITA , ; FUJIKAWA,. DIFFUSION-LIMITED GROWTH IN BACTERIAL COLONY FORMATION. **Physica A**, v. 168, p. 498-506, 1990.
9. LÖWE, et al. On the evolution of the snow surface during snowfall. **GEOPHYSICAL RESEARCH LETTERS**, v. 34, 2007.
10. CARRASCO, I. S. D. S. **Efeitos das condições iniciais na dinâmica de crescimento de interfaces**. VIÇOSA: [s.n.], 2018.
11. BARABÁSI, A.-L. **Fractal concepts in surface growth**. 1º. ed. Boston, Massachusetts: Cambridge, v. 1º, 1995.
12. KRUG, J. Origins of scale invariance in growth processes. **Advances in Physics**, n. 46, p. 139–282, 1997.
13. CLOUET, et al. Kinetic Monte Carlo Simulations of Precipitation. **Advanced Engineering Materials**, v. 8, 2006.
14. ROSENTHAL, et al. Diffusion and Growth of Metal Clusters in Nanocomposites: A Kinetic Monte Carlo Study. **Contrib. Plasma Phys.**, v. 51, p. 971-980, 2011.

15. PAPAJOVIÁ, et al. A study of a kinetic rate equation model for simulations of MBE crystal growth: a comparison with Monte Carlo simulations. **Thin Solid Films**, v. 267, p. 47-50, 1995.
16. ATMAN, A. P. F. et al. Lattice model for approximate self-affine soil profiles. **Physica A**, v. 295, p. 64-70, 2001.
17. KARDAR, M.; PARISI, G.; ZHANG, Y.-C. Dynamic Scaling of Growing Interfaces. **PHYSICAL REVIEW LETTERS**, v. 56, n. 9, 1986.
18. EDWARDS, S. F.; WILKINSON, D. R. The surface statistics of a granular aggregate. **Proc. R. Soc. Lond. A**, v. 381, p. 17-31, 1982.
19. LAI, Z.-W.; SARMA, S. D. Kinetic Growth with Surface Relaxation: Continuum versus Atomistic Models. **Physical Review Letter**, v. 66, 1991. ISSN 18.
20. VILLAIN, J. Continuum models of crystal growth from atomic beams with and without. **J. Phys. I**, v. 1, p. 19-42, 1991.
21. GIESSIBL, F. J. Advances in atomic force microscopy. **REVIEWS OF MODERN PHYSICS**, v. 75, 2003.
22. MEYER, ; M AMER,. Novel optical approach to atomic force microscopy. **Appl. Phys. Lett.**, v. 53, 1988.
23. R. ALBRECHT, ; F. QUATE,. Atomic resolution with the atomic force microscope on conductors and nonconductors. **Journal of Vacuum Science & Technology A**, v. 6, 1988.
24. LECHENAULT, F. et al. Effects of Finite Probe Size on Self-Affine Roughness Measurements. **Physical Review Letters**, v. 104, 2010.
25. MEAKIN, P.; RAMANLAL, P.; SANDER, L. M. Ballistic deposition on surfaces. **PHYSICAL REVIEW A**, v. 34, n. 6, 1986.
26. M. D'SOUZA,. ANOMALIES IN SIMULATIONS OF NEAREST NEIGHBOR BALLISTIC DEPOSITION. **International Journal of Modern Physics C**, v. 8, p. 941–951, 1997.
27. NAGATANI, T. From ballistic deposition to the Kardar-Parisi-Zhang equation through a limiting procedure. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 58, 1998.
28. FERRARI, P. L.; FRINGS, R. Finite Time Corrections in KPZ Growth Models. **J Stat Phys**, v. 144, p. 1123–1150, 2011.
29. J. OLIVEIRA, ; D. A. AARÃO REIS,. Finite-size effects in roughness distribution scaling. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 76, 2007.

30. REIS, F. D. A. A. Universality and corrections to scaling in the ballistic deposition model. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 63, 2001.
31. KELLING, J.; ÓDOR, G. Extremely large-scale simulation of a Kardar-Parisi-Zhang model using graphics cards. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 84, n. 061150, 2011.
32. KERTÉSZ, J.; WOLF, D. E. Noise reduction in Eden models: II. Surface structure and intrinsic width. **J. Phys. A: Math**, v. 21, 1988.
33. ALVES, S. G.; OLIVEIRA, T. J.; FERREIRA, S. C. Origins of scaling corrections in ballistic growth models. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 90, n. 052405, 2014.
34. MELLO, B. A.; CHAVES, A. S.; OLIVEIRA, F. A. Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 63, n. 041113, 2001.
35. ALVES, W. S. et al. Analysis of etching at a solid-solid interface. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 94, n. 042119, 2016.
36. CHAN PARK, S.; KIM, ; MAN PARK, J. Derivation of continuum stochastic equations for discrete growth models. **Phys. Rev. E**, v. 65, 2001.
37. ASSIS, T. A. D. **Private Communication**. UFBA. [S.I.]. 2022.
38. TOMÉ, T.; JOSÉ DE OLIVEIRA, M. **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade**. 2^a. ed. [S.I.]: [s.n.], 2014.
39. KAC, M. Random Walk and the Theory of Brownian Motion. **The American Mathematical Monthly**, v. 57, p. 369-391, 1947.
40. RISKEN, H. **The Fokker -Planck Methods of Solution and Applications**. 1. ed. [S.I.]: Springer-Verlag, v. 18, 1984.
41. BINDER, K. **Monte Carlo Method in Statistical Physics**. 2. ed. Berlin: Springer-Verlag, 1986.
42. BINDER, K.; HEERMANN, D. H. **Monte Carlo Simulation in Statistical Physics**. 2. ed. Berlin: Springer-Verlag, 1992.
43. HAMMERSLEY, J. M.; HANDSCOMB, D. C. **Monte Carlo Methods**. London: Chapman and Hall, 1964.
44. MAUNUKSELA, J. et al. Kardar–Parisi–Zhang scaling in kinetic roughening of fire fronts. **Physica A**, v. 166, p. 372–376, 1999.
45. S. Kimiagar. Fractal Shape of Cancer Tumor Growth. **Biochemistry and Biophysics (BAB)**, v. 1, n. 1, 2013.

46. ASSIS, T. A. D.; REIS, F. D. A. A. Dynamic scaling and temperature effects in thin film roughening. **JSTAT**, v. 6, 2015.
47. T. A. D. A.; , F. D. A. A. R. Thin film deposition with time-varying temperature. **J. Stat. Mech**, 2013.
48. FAMILY, F.; VICSEK, T. Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model. **J. Phys. A: Math. Gen.**, v. 18, p. 75-81, 1985.
49. LUIS, E. E. M. **Determinação do expoente de rugosidade local em modelos da classe de epitaxia por feixe molecular não linear**. Salvador: [s.n.], 2019.
50. XIA, H. et al. Anomalous dynamic scaling of the non-local growth equations. **Physica A**, v. 388, p. 1399–1404, 2009.
51. CASTRO, M. et al. Anomalous scaling in a nonlocal growth model in the Kardar-Parisi-Zhang universality class. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 57, 1998. ISSN 3.
52. CHAME, ; D.A. AARÃO REIS, F. Scaling of local interface width of statistical growth models. **Surface Science**, v. 553, p. 145–154, 2004.
53. REIS, F. D. A. A. Scaling of local roughness distributions. **J. Stat. Mech**, 2015.
54. SARMA, S. D. et al. Scale invariance and dynamical correlations in growth models of molecular beam epitaxy. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 53, 1996. ISSN 1.
55. E. E. M. L.; , T. A. D. A.; , S. C. F. Optimal detrended fluctuation analysis as a tool for the determination of the roughness exponent of the mounded surfaces. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 95, 2017. ISSN 042801.
56. LUIS, E. E. M. et al. Local roughness exponent in the nonlinear molecular-beam-epitaxy. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 99, n. 022801, 2019.
57. W. EVANS, J.; A. THIEL, P.; C. BARTELT, M. Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds. **Surface Science Reports**, v. 61, p. 1-128, 2006.
58. FAMILY, F. Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion. **J. Phys. A: Math**, v. 19, p. 441-446, 1986.
59. FAMILY, F. Dynamic Scaling And Phase Transitions In Interface Growth. **Physica A**, v. 168, p. 561-580 , 1990.

-
60. ANTAL, T.; RÁCZ, Z. Dynamic scaling of the width distribution in Edwards-Wilkinson type models. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 54, n. 3, 1996.
 61. CORWIN, I. The Kardar–Parisi–Zhang equation and universality class. **World Scientific Publishing Company**, 2012.
 62. HALPIN-HEALY, T. (2+1)-Dimensional Directed Polymer in a Random Medium: Scaling Phenomena and Universal Distributions. **PHYSICAL REVIEW LETTERS**, v. 109, n. 170602, 2012.
 63. HALPIN-HEALY, T.; ZHANG, Y.-C. KINETIC ROUGHENING PHENOMENA, STOCHASTIC GROWTH, DIRECTED POLYMERS AND ALL THAT. **Physics Reports**, 1995. 218-405.
 64. ALMEIDA, R. A. L. et al. Universal fluctuations in the growth of semiconductor thin films. **PHYSICAL REVIEW B**, v. 89, n. 045309, 2014.
 65. EL-NASHAR, H. F.; CERDEIRA, H. A. Dynamic scaling in a ballistic deposition model for a binary system. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 61, n. 6, 2000.
 66. F. C. et al. Dynamics of front propagation in the catalytic CO oxidation on Pt₁₀₀.... **JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS**, v. 110, n. 16, 1999.
 67. PAGNANI, A.; PARISI, G. Numerical estimate of the Kardar-Parisi-Zhang universality class in (2+1) dimensions. **Physical Review E**, v. 92, 2015.
 68. LÄSSIG, M. Quantized Scaling of Growing Surface. **Physical Review Letters**, v. 80, 1998.
 69. VOID, J. M. J. *Colloid Interface Sci*, v. 18, 1963.
 70. N.SUTHERLAND, D. J. *Colloid Interface Sci*, v. 22, 1966.
 71. BAIOD, R. et al. Dynamical scaling of the surface of finite-density ballistic aggregation. **PHYSICAL REVIEW A**, v. 38, 1988. ISSN 7.
 72. SARMA, S. D. Kinect surface roughening and molecular beam epitaxy. **Fractals**, 1, n. 4, 1993. 784-794.
 73. JOYCE, B. A. et al. In Situ Studies of Epitaxial Silicon Growth by Gas Source Molecular Beam Epitaxy. **ADVANCED MATERIALS FOR OPTICS AND ELECTRONICS**, v. 7, p. 215-224, 1997.
 74. POLITI, P. et al. Instabilities in crystal growth by atomic or molecular beams. **Physics Reports**, v. 324, p. 271-404, 2000.
 75. JANSSEN, H. K. On Critical Exponents and the Renormalization of the Coupling Constant in Growth Models with Surface Diffusion. **Physical Review Letters**, v. 78, 1997. ISSN 6.

-
76. KIM, Y.; PARK, D. K.; KIM, J. M. Conserved growth in a restricted solid-on-solid model. **J. Phys. A. Math**, v. 27, 1994.
 77. HUANG, Z.-F.; GU, B.-L. Stochastic equation for conserved growth in a restricted solid-on-solid model. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 57, n. 4, 1998.
 78. KIM, Y.; KIM, J.-M. Surface morphology, hopping, and current in a conserved growth model with a restricted solid-on-solid condition. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 55, n. 4, 1997.
 79. D'SOUZA, R. M. ANOMALIES IN SIMULATIONS OF NEAREST NEIGHBOR BALLISTIC DEPOSITION. **International Journal of Modern Physics C**, v. 8, n. 4, 1997.
 80. D'SOUZA, R. M.; BAR-YAM, Y.; KARDAR, M. Sensitivity of ballistic deposition to pseudorandom number generators. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 57, n. 5, 1998.
 81. OLIVEIRA, T. J.; REIS, F. D. A. A. Finite-size effects in roughness distribution scaling. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 76, 2007.
 82. FERRARI, P. L.; FRINGS, R. Finite Time Corrections in KPZ Growth Models. **J Stat Phys**, v. 144, p. 1123–1150, 2011.
 83. FARNUDI, B.; VVEDENSKY, D. D. Large-scale simulations of ballistic deposition: The approach to asymptotic scaling. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 83, 2011.
 84. ALVES, S. G.; OLIVEIRA, T. J.; FERREIRA, S. C. Origins of scaling corrections in ballistic growth models. **PHYSICAL REVIEW E**, n. 90, 2014.
 85. TAMMARO, M.; EVANS, J. W. Chemical diffusivity and wave propagation in surface reactions: Lattice-gas model mimicking CO-oxidation with high CO-mobility. **J. Chem. Phys**, v. 108, 1998.
 86. CHÁVEZ, F. et al. Dynamics of front propagation in the catalytic CO oxidation on Pt(100). **J. Chem. Phys**, v. 110, 1999.
 87. MORO, E. Internal Fluctuations Effects on Fisher Waves. **Physical Review Letters**, v. 87, 2001.
 88. LUIS, E. E. M. et al. Local roughness exponent in the nonlinear molecular-beam-epitaxy. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 99, n. 022801, 2019.
 89. CASPERSEN, K. J. et al. Development and ordering of mounds during metal₁₀₀... homoepitaxy. **PHYSICAL REVIEW B**, v. 65, 2002.

90. LEAL, F. F.; FERREIRA, S. C.; FERREIRA, S. O. Modelling of epitaxial film growth with an Ehrlich–Schwoebel barrier dependent on the step height. **J. Phys.: Condens. Matter**, v. 23, 2011.
91. Contact Mode. Park SYSTEMS. Disponível em: "<https://bityli.com/2A80F>". Acesso em: 23/01/2023.
92. DAGUIER, P. et al. Quantitative analysis of a fracture surface by atomic force microscopy. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 53, 1996.
93. BOUCHAUD, E. Scaling properties of cracks. **J. Phys.: Condens. Matter**, v. 9, 1997.
94. MOUROT, G. et al. Scaling properties of mortar fracture surfaces. **International Journal of Fracture**, v. 140, p. 39-54, 2006.
95. BOUCHAUD, E. THE MORPHOLOGY OF FRACTURE SURFACES: A TOOL FOR UNDERSTANDING CRACK PROPAGATION IN COMPLEX MATERIALS. **Surface Review and Letters**, v. 10, p. 797-814, 2003.
96. MAZERAN, P.-E.; ODONI, L.; LOUBET, J.-L. Curvature radius analysis for scanning probe microscopy. **Surface Science**, v. 585, p. 25–37, 2005.
97. KIENBERGER, et al. Improving the contrast of topographical AFM images by a simple averaging filter. **Ultramicroscopy**, v. 106, p. 822–828, 2006.
98. ANGERMANN, et al. Smoothing and passivation of special Si(111) substrates: studied by SPV, PL, AFM and SEM measurements. **Anal Bioanal Chem**, v. 390, p. 1463–1470, 2008.
99. YAMANAKA, K.; TSUJI, T.; NOGUCHI, A. Nanoscale elasticity measurement with in situ tip shape estimation in atomic force microscopy. **Review of Scientific Instrument**, v. 71, 2000.
100. MAUGIS, ; BARQUINS ,. Adhesive contact of sectionally smooth-ended punches on elastic half-spaces: theory and experimen. **J. Phys. D: Appl. Phys**, and M Barquins, v. 16, 1983.
101. W. CARPICK, et al. Measurement of interfacial shear (friction) with an ultrahigh vacuum atomic force microscope. **J. Vac. Sci. Technol. B**, v. 14, 1996.
102. ALVES, S. G.; ARAUJO, C. I. L. D.; FERREIRA, S. C. Hallmarks of the Kardar–Parisi–Zhang universality class elicited by scanning probe microscopy. **New J. Phys**, v. 18, 2016.
103. ALMEIDA, R. A. L. et al. Initial pseudo-steady state & asymptotic KPZ universality in semiconductor on polymer deposition. **Scientific Reports**, v. 7, 2017.

-
104. GÓMEZ-MOÑIVAS, S. et al. Theory of electrostatic probe microscopy: A simple perturbative approach. **APPLIED PHYSICS LETTERS**, v. 76, 2000.
 105. CHO, S.-M. et al. Electrostatic force microscopy study on the domain switching properties of the $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8})\text{O}_3$ thin films with different crystallographic orientations for the probe-based data storage. **Ultramicroscopy**, v. 108, p. 1081-1085, 2008.
 106. BALKE, et al. Exploring Local Electrostatic Effects with Scanning Probe Microscopy: Implications for Piezoresponse Force Microscopy and Triboelectricity. **Center for Nanophase Materials Sciences**, v. 8, p. 10229–10236, 2014.
 107. LISCIO, A.; PALERMO, ; SAMORI,. Nanoscale Quantitative Measurement of the Potential of Charged Nanostructures by Electrostatic and Kelvin Probe Force Microscopy: Unraveling Electronic Processes in Complex Materials. **ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH**, v. 43, p. 541-550, 2010.
 108. STEVENS, R. M. D. et al. Carbon nanotubes as probes for atomic force microscopy. **Nanotechnology**, v. 11, p. 1-5, 2000.
 109. CHEUNG, C. L.; , J. H. H.; LIEBER, C. M. Carbon nanotube atomic force microscopy tips: Direct growth by chemical vapor deposition and application to high-resolution imaging. **PNAS**, v. 97, p. 3809–3813, 2000.
 110. WILSON, N. R.; MACPHERSON, J. V. Carbon nanotube tips for atomic force microscopy. **nature nanotechnology**, v. 4, 2009.
 111. WANG, Y.; CHEN, X. Carbon nanotubes: A promising standard for quantitative evaluation of AFM tip apex geometry. **Ultramicroscopy**, v. 107, p. 293–298, 2007.
 112. OLIVEIRA, T. J.; REIS, F. D. A. A. Roughness exponents and grain shapes. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 83, 2011.
 113. PENG, C.-K. et al. Mosaic organization of DNA nucleotides. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 49, 1994.
 114. KERTESZ, J.; WOLF, D. E. Noise reduction in Eden models: II. Surface structure and intrinsic width. **J. Phys. A: Math**, v. 21, p. 747-761, 1988.
 115. TRACY, C. A.; WIDOM, H. Level-spacing distributions and the Airy kernel. **Physics Letters B**, v. 305, p. 115-118, 1993.
 116. TAKEUCHI, K. A.; SANO, M. Universal Fluctuations of Growing Interfaces: Evidence in Turbulent Liquid Crystals. **PHYSICAL REVIEW LETTERS**, v. 104, n. 230601, 2010.

-
117. SITTER, H.; HERMAN, M. A. **Molecular Beam Epitaxy: Fundamentals and current status**. 2^a. ed. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1996.
118. SARMA, S. D.; TAMBORENEA, P. A New Universality class for Kinetic Growth: One-Dimensional Molecular-Beam Epitaxy. **PHYSICAL REVIEW LETTERS**, v. 66, n. 3, 1991.
119. SALINAS, S. R. A. **Introdução à Física Estatística**. 2^a. ed. [S.l.]: [s.n.], 2013.
120. PRAHOFER, ; SPOHN,. Statistical self-similarity of one-dimensional growth processes. **Physica A**, v. 279, p. 342–352, 2000.
121. OLIVEIRA, T. J.; REIS, F. D. A. A. Finite-size effects in roughness distribution scaling. **PHYSICAL REVIEW E**, v. 76, n. 061601, 2007.
122. MOZO, E. E. **Private Communication**. [S.l.]. 2022.
123. MEAKIN, et al. Ballistic deposition on surfaces. **PHYSICAL REVIEW A**, v. 34, 1986.
124. MARINARI, E.; PAGNANI, A.; PARISI, G. Critical exponents of the KPZ equation via multi-surface coding numerical simulations. **J. Phys. A: Math**, v. 33, 2000.
125. GRINSTEIN, G.; LEE, D.-H.; SACHDEV, S. Conservation Laws, Anisotropy, and "Self-Organized Criticality" in Noisy Nonequilibrium Systems. **PHYSICAL REVIEW LETTERS**, v. 64, n. 16, 1990.
126. GIESSIBL, F. J.; BINNIG, G. True atomic resolution on KBr with a low-temperature atomic force microscope in ultrahigh vacuum. **Ultramicroscopy**, v. 42-44, p. 281–286, 1992.
127. GIESSIBL, F. J.; TRAFAS, B. M. Piezoresistive cantilevers utilized for scanning tunneling and scanning force microscope in ultrahigh vacuum. **Rev. Sci. Instrum.**, v. 65, p. 1923–1929, 1994.
128. PRÄHOFER, M.; SPOHN,. Universal Distributions for Growth Processes in 1+1 Dimensions and Random Matrices. **Physical Review Letters**, v. 84, 2000.
129. KRUG, J.; MEAKIN, ; HALPIN-HEALY, T. Amplitude universality for driven interfaces and directed polymers in random media. **PHYSICAL REVIEW A**, v. 45, 1992.
130. T. S.; , H. S. The 1 + 1-dimensional Kardar–Parisi–Zhang equation and its universality class. **J. Stat. Mech. (2010)**, 2010.

131. T. A. D. A.; , F. D. A. A. R. Dissolution of minerals with rough surfaces. **Geochimica et Cosmochimica Acta**, v. 228, p. 27-41, 2018.
132. P. C.; , P. L. D. Exact Solution for the Kardar-Parisi-Zhang Equation with Flat Initial Condition. **PHYSICAL REVIEW LETTERS**, v. 106, n. 250603, 2011.
133. J. J. R.; , J. M. L.; , M. A. R. Generic Dynamic Scaling in Kinetic Roughening. **PHYSICAL REVIEW LETTERS**, v. 84, 2000. ISSN 10.