

Edwin Edgar Mozo Luis

DETERMINAÇÃO DO EXPOENTE DE RUGOSIDADE LOCAL EM
MODELOS DA CLASSE DE EPITAXIA POR FEIXE MOLECULAR
NÃO LINEAR

Salvador-Bahia, Brasil
2019

Universidade Federal da Bahia
Instituto de Física

Edwin Edgar Mozo Luis

DETERMINAÇÃO DO EXPOENTE DE RUGOSIDADE LOCAL EM
MODELOS DA CLASSE DE EPITAXIA POR FEIXE MOLECULAR
NÃO LINEAR

Tese de doutorado apresentada ao Instituto de
Física como parte dos requisitos exigidos para a
obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Thiago Albuquerque de
Assis

Co-orientador: Prof. Dr. Silvio da Costa Ferreira
Júnior

Salvador-Bahia, Brasil
2019

Agradecimentos

Ao meu orientador Prof. Thiago Albuquerque de Assis, um agradecimento especial pelo tempo gasto com conversas para sanar dúvidas que surgiram durante o desenvolvimento desta investigação. Agradeço por sempre ter sido prestativo, independentemente do dia da noite ou da hora.

Ao Prof. Silvio da Costa Ferreira Júnior pela coorientação e pelas discussões frutíferas acerca do método análise ótima de flutuações destendenciadas e também pela oportunidade de passar um tempo no departamento de física da Universidade Federal de Viçosa.

Ao Prof. Fábio Aarão Reis pelas discussões frutíferas acerca do crescimento de nanofios e o número médio de passos.

Ao Prof. Roberto Fernandes Silva Andrade acerca de discussões de correlações cruzadas e do método análise ótima de flutuações destendenciadas.

Finalmente, mas não menos importante, agradeço ao Grupo de Física de Superfícies e Materiais (GSUMA), ao programa de Pós-Graduação em Física e à CAPES pelo suporte financeiro. Agradeço aos meus colegas de doutorado, aos meus colegas Colombianos e a minha namorada Anne Alves por todo o apoio moral.

Sumário

Resumo	x
Abstract	xii
1 INTRODUÇÃO	1
2 MÉTODOS PARA DETERMINAR EXPOENTES DE RUGOSIDADE LOCAL E MODELOS DISCRETOS DA CLASSE VLDS	5
2.1 Rugosidade Global	5
2.2 Função de Auto-Correlação Altura-Altura	7
2.3 Rugosidade Local Padrão	9
2.4 Rugosidade Local com Análise de Flutuações Destendenciadas	11
2.5 Rugosidade Local com Análise Ótima de Flutuações Destendenciadas	13
2.6 Modelos Discretos da Classe VLDS	16
2.6.1 Modelo CRSOS	16
2.6.2 Modelo DT	17
2.6.3 Modelo CV	18
3 RESULTADOS E DISCUSSÕES EM MODELOS DISCRETOS DE 1+1 E 2+1 DIMENSÕES	20
3.1 Resultados em 1+1 Dimensões	20
3.1.1 Validação do Método ODFA _n	20
3.1.2 DFA _n e ODFA _n no Modelo CRSOS	21
3.1.3 DFA _n e ODFA _n no Modelo CV	24
3.1.4 DFA _n e ODFA _n no Modelo DT	26
3.1.5 Considerações para 1+1 Dimensões	30
3.2 Resultados em 2+1 Dimensões	31
3.2.1 DFA _n e ODFA _n no Modelo CV	31
3.2.2 Considerações para 2+1 Dimensões	33
3.3 Número Médio de Passos	34
4 Conclusões	38
Apendices	40
A Classe VLDS	41
B Modelo de Etching	43

C	Algoritmo de Listas para o Modelo CV	44
D	Artigos Publicados	46
	Referências Bibliográficas	61

Lista de Figuras

1.1	Imagem obtida via AFM quando GaAs é depositado em um substrato de GaAs ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$).	2
1.2	Imagens obtidas via AFM dos filmes CdTe com diferentes espessuras: (a) ~ 10 nm, (b) ~ 40 nm e (c) ~ 120 nm.	2
1.3	Superfície gerada via simulação computacional com o modelo CV.	4
2.1	(a) Evolução da rugosidade global para uma dinâmica auto-afim: regime de crescimento ($t \ll t_x$) e saturação ($t \gg t_x$). (b) Ilustração do expoente β e a dependência de $\omega_{sat}(L, t)$ com tamanho lateral L . (c) e (d) Dependência dos expoentes α e z com o tamanho lateral do sistema L . Utilizamos o modelo CRSOS em 1 + 1 dimensões, com 800 realizações independentes. A linha tracejada indica os expoentes esperados para a correspondente classe de universalidade.	8
2.2	Colapso de curvas de rugosidade global usando a relação de FV, para o modelo CRSOS em 1+1 dimensões, onde $\alpha = 1$ e $z = 3$ para 800 realizações independentes.	9
2.3	(a) Função de auto-correlação altura-altura normalizada para um perfil auto-afim, considerando o modelo RSOS em 1 + 1 dimensões com tamanho lateral $L = 10^3$. (b) Segmento de um perfil auto-afim para $t = 10^4$ no modelo RSOS. (c) Função de auto-correlação altura-altura para um perfil com comprimento característico: modelo DT em 1 + 1 dimensões com tamanho lateral $L = 2^{14}$. (d) Segmento de um perfil com comprimento característico no modelo DT em $t = 10^5$. Os “insets” (a) e (c) mostram a evolução de $\xi_{0,m}$ como função de t	10
2.4	(a) Evolução da rugosidade local para um regime de crescimento $t \ll l^z$ e saturação $t \gg l^z$ no modelo CRSOS em 1 + 1 dimensões com tamanho lateral de $L = 2^{14}$. A linha tracejada vermelha indica o valor esperado do expoente de rugosidade local da classe de universalidade. (b) Colapso de curvas de rugosidade local usando a relação de FV. A simulação foi realizada utilizando 100 realizações independentes.	12
2.5	Ilustração do método DFA aplicado numa série. Tendências locais em janelas de tamanho lateral 100 e 200 são mostradas em (a) e (b), respectivamente.	12
2.6	Ilustra a distância mínima desde um ponto do perfil de coordenadas x_0, h_{x_0} , até o polinômio de ajuste G_i : (a) ajuste polinomial de grau 1; (b) ajuste polinomial de grau 2.	15

- 2.7 (a) Ilustração da evolução da rugosidade local, utilizando diferentes métodos, como função do tamanho lateral da janela para $t = 10^6$. (b) Expoente de rugosidade local efetivo, calculado usando a Eq. 2.25, onde a linha tracejada indica o valor esperado do expoente de rugosidade local para este modelo $\alpha_{\text{VLDS}}^{\text{loc}} = 1$. O “inset” mostra a evolução do expoente de crescimento usando ODFA₁. 16
- 2.8 Regras de crescimento para diferentes modelos, em que as setas indicam a coluna escolhida aleatoriamente. A cor preta representa as partículas depositadas, e a verde as novas partículas. (a) CRSOS, (b) DT em 1 + 1 dimensões e (c) ilustração esquemática do modelo CV em 2 + 1 dimensões. 17
- 3.1 (a) Condição inicial gerada usando a função Weierstrass $t = 0$ (painel inferior) e seu perfil após de $t = 3 \times 10^3$ (painel superior), usando o modelo de Etching. (b) Ilustração da função de auto-correlação altura-altura. (c) Rugosidade local e (d) Expoentes efetivos utilizando os diferentes métodos. 22
- 3.2 Modelo CRSOS: (a) Perfil para $t = 10^6$. (b) Função de auto-correlação altura-altura normalizada como função de r para diferentes valores de t . (c) Rugosidade local como função do tamanho lateral da janela l (linhas tracejadas azul 0,7 e vermelha 1) e (d) expoente efetivo da rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^6$. Os “insets” de (b) e (d) ilustram a evolução dos zeros da função de correlação versus t e evolução $\omega^{(\text{ODFA}_2)}(l = L)$ versus t 23
- 3.3 Segmento de perfil do modelo CRSOS, sobre o qual é realizado um ajuste polinomial de segunda ordem ($P(x)_{n=2}$), através de mínimos quadrados, em que se ilustra a distância δ^2 calculada com os métodos DFA₂ e ODFA₂, respectivamente. 24
- 3.4 Modelo CV: (a) Perfil para $t = 10^6$. (b) Função de auto-correlação altura-altura como função de r para diferentes t . (c) Rugosidade local como função do tamanho lateral da janela l (linhas tracejadas azul 0,7 e vermelha 1) e (d) Expoente efetivo de rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^6$. Os “insets” (b) e (c) ilustram: evolução dos zeros da função de correlação versus t e $\omega^{(\text{ODFA}_2)}(l = L)$ versus t 25
- 3.5 Modelo DT: (a) Perfil para $t = 10^8$. (b) Função de auto correlação altura-altura como função de r para diferentes t . (c) Rugosidade local como função do tamanho lateral da janela l (linhas tracejadas azul 0.7 e vermelha 1) e (d) Expoente efetivo de rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^8$. Os “insets” (b) e (c) ilustram: evolução dos zeros da função de correlação versus t e $\omega^{(\text{ODFA}_2)}(l = L)$ versus t 27
- 3.6 Segmento de perfil para o modelo DT, no qual foi realizado um ajuste polinomial de segunda ordem ($P(x)_{n=2}$) através do método de mínimos quadrados, onde se ilustra a distância δ^2 com os métodos DFA₂ e ODFA₂, respectivamente. 28

3.7	Modelo DT com redução de ruído $m = 4$: (a) Perfil para $t = 10^8$. (b) Função de correlação altura-altura como função de r para diferentes t . (c) Rugosidade local como função do tamanho lateral da janela l (linhas tracejadas azul 0,7 e vermelha 1) e (d) Expoente efetivo de rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^8$. As subfiguras (b) e (c) ilustram: evolução dos zeros da função de correlação versus t . Evolução $\omega^{(ODFA_2)}(l = L)$ versus t	29
3.8	Segmento de perfil para o modelo DT, onde foi aplicada a técnica de redução de ruído para $m = 4$, sobre o qual é realizado um ajuste polinomial da segunda ordem ($P(x)_{n=2}$) através do método de mínimos quadrados, em que se ilustra a distância δ^2 com DFA ₂ e ODFA ₂ , respectivamente.	30
3.9	(a) Morfologia da superfície gerada com o modelo CV em $t = 10^6$, na qual observa-se formação de morros. (b) Função de auto-correlação altura-altura como função de r . A subfigura mostra a evolução do comprimento lateral médio, obtido com os mínimos da função Γ . (c) Rugosidade local em função do tamanho lateral da janela (l) para diferentes métodos e valores de t . (d) Expoente efetivo de rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^6$. Cálculos realizados com 100 amostras independentes.	32
3.10	(a) Evolução temporal da rugosidade local para uma janela de tamanho lateral $l = 5$, para o modelo CV, usando os métodos DFA ₀ , DFA ₁ e ODFA ₁ . (b) Transiente de escala anômala para o modelo CV, usando os métodos DFA ₀ , DFA ₁ e ODFA ₁ , com $y = 0,09, 0,12$ e $0,23$, respectivamente. O tamanho lateral da janela sobre a qual foi avaliada a rugosidade local $l = 5$. O “inset” apresenta um aumento da escala vertical para o método DFA ₁	34
3.11	Escala da distribuição do número médio de passos para valores baixos de Υ	35
3.12	Escala da distribuição do número médio de passos para valores intermediários de Υ	35
3.13	Escala da distribuição do número médio de passos para valores altos de Υ	36
3.14	Colapso do número médio de passos.	37
3.15	Parte de uma superfície com dois terraços e uma variedade de sítios com suas respectivas ligações.	37
B.1	Regras de crescimento para o modelo de Etching na versão original em 1+1 dimensões, onde as setas indicam a coluna escolhida aleatoriamente. A cor preta representa as partículas depositadas, e a verde as novas partículas.	43
C.1	Tempo de CPU vs p. Figuras retiradas da Ref. [1]	45

Lista de Tabelas

3.1	Comparação de valores do expoente de rugosidade local para os diferentes métodos, em que não se inclui resultados para o método DFA_0	31
-----	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----

Lista de Siglas e Símbolos

Sigla	Definição
AFM	Atomic Force Microscopy (Microscopia de Força Atômica)
CRSOS	solido sobre solido conservativo
CVD	Chemical Vapor Deposition (Deposição por Vapor Químico)
CV	Clarke-Vvedensky
d	dimensão euclidiana
D	taxa de difusão
DFA ₀	rugosidade local padrão
DFA _{n}	rugosidade local com análise de flutuações destendenciadas
DT	Das Sarma-Tamborenea
E	energia de ativação
EW	Edward-Wilkinson
E_a	energia de ligação dos átomos (adsorvidos) com o filme/substrato
E_b	energia de ligação de um átomo com seus primeiros vizinhos laterais
F	taxa de deposição
FV	relação de escala de Family-Vicsek
h	altura de uma coluna
KPZ	Kadar-Parisi-Zhang
k_B	constante de Boltzmann
κ	expoente anomâlo
l	tamanho lateral da janela ou escala de observação
L	tamanho lateral de uma rede discreta
MBE	<i>Molecular Beam Epitaxy</i> (Epitaxia por Feixe Molecular)
N_p	número de passos
$\langle N_p \rangle$	número médio de passos
RG	teoria de renormalização de grupo
RSOS	<i>Restricted Solid on Solid</i> (Sólido sobre Sólido Restrito)
SOS	<i>Solid on Solid</i> (sólido sobre sólido)
STM	Scanning Tunneling Mycroscopy (Microscopia de Varredura por Tunelamento)
t	tempo de crescimento de um filme
T	temperatura
VLDS	Villain-Lai-Das Sarma
ODFA _{N}	rugosidade local com análise ótima de flutuações destendenciadas
z	expoente dinâmico
z_c	expoente de <i>coarsening</i>
α	expoente da rugosidade global
α_{eff}	expoente da rugosidade local efetivo
α_{loc}	expoente da rugosidade local
β	expoente de crescimento
Γ	função de auto-correlação altura-altura
η	ruído Gaussiano
ξ	comprimento de correlação lateral ou comprimento característico
ω	largura de interface (ou rugosidade)

$\omega^{(n)}$	valor da rugosidade local, onde n é o grau do polinômio de ajuste
ω_{sat}	valor da rugosidade de saturação

Resumo

O crescimento de interfaces fora do equilíbrio via simulação computacional é de alta relevância para investigar fenômenos microscópicos, por exemplo, o papel da difusão dos átomos nos terraços e perímetros dos aglomerados. Além disso, encontrar um conjunto de expoentes de escala nos permite classificar as interfaces dentro de uma classe de universalidade. No caso em que se observe escala normal de rugosidade superficial, determinar o expoente de rugosidade global é equivalente a encontrar o expoente de rugosidade local. Alguns resultados reportados na literatura, obtidos usando simulações computacionais sobre modelos que se dizem pertencer à classe Villain-Lai-Das Sarma (VLDS), sugerem que o expoente de rugosidade global é distinto do expoente de rugosidade local, podendo levar a conclusões de que escala anômala assintótica existe na classe VLDS. Tal característica pode ser justificada pelos expoentes de rugosidade global maiores que a unidade. Nesta tese, introduzimos um método para medir flutuações locais de altura na interface, baseado em calcular a menor distância de um ponto do perfil até um polinômio de ajuste de grau n . O método é nomeado de Análise Ótima de Flutuações Destendenciadas (ODFA $_n$). Realizamos uma comparação com o método baseado na Análise de Flutuações Destendenciadas (*Detrended Fluctuations Analysis*-DFA $_n$) e o método da rugosidade local padrão (DFA $_0$). O objetivo é extrair o expoente de rugosidade local sobre perfis/superfícies geradas pelos modelos de rede com deposição, a saber: sólido sobre sólido conservativo (*Conserved Growth in a Restricted Solid-on-Solid model*-CRSOS), (*Das Sarma and Tamborenea*-DT) e (*Clarke Vvedensky*-CV), que se acreditam pertencer à classe VLDS. Observamos que estes modelos apresentam um regime transiente em que perfis/superfícies apresentam comprimento característico (estruturas de morros). Para estimar o comprimento lateral médio dos morros, usou-se o valor do primeiro zero ou mínimo da função de auto-correlação altura-altura normalizada. Nossos resultados para o expoente de rugosidade local extraído com o método ODFA $_n$, são compatíveis com o expoente calculado, usando a teoria de renormalização de grupo com correções de primeiro e segundo laço para a classe VLDS. Para os modelos CRSOS e DT, este último considerando uma situação em que a técnica de redução de ruído é aplicada em $d = 1$ dimensões e para o modelo CV, com $d = 1, 2$ dimensões, utilizaremos um ajuste polinomial com $n = 1, 2$. Observa-se um melhor “scaling” para $n = 2$, em que os expoentes de rugosidade local efetivos foram extraídos para comprimentos de escala da mesma ordem do comprimento lateral médio dos morros. No modelo CV em $d = 2$, um transiente de escala anômala foi investigado para escalas pequenas, calculando-se a rugosidade local. Por se tratar de um modelo mais realista na simulação do crescimento de filmes finos, estudamos, ademais, a distribuição do número médio de passos, N_p , de átomos adsorvidos na superfície com o modelo CV, em função dos parâmetros R e ϵ , onde R é a razão entre a taxa de difusão, D_0 (considerando átomos sem vizinhos laterais) e a taxa de deposição, F , e ϵ o parâmetro

associado à probabilidade de descolamento dos átomos com seus vizinhos laterais. Os nossos resultados mostram distribuições, na forma de exponenciais estendidas, no regime de baixas temperaturas. No regime de altas temperaturas os nossos resultados indicam que o número médio de passos escala com $R\epsilon^2$, sugerindo que, quando o descolamento de “kink sites” se torna possível, existe uma grande quantidade de deslocamentos de átomos que controlam N_p .

Abstract

The growth of out-of-equilibrium interfaces via computer simulation is of high relevance for investigating microscopic phenomena, for example, the role of atom diffusion in terraces and cluster perimeters. In addition, finding a set of scaling exponents allows us to classify interfaces within a universality class. If a normal surface roughness scale is observed, determining the global roughness exponent is equivalent to finding the local roughness exponent. Some results reported in the literature, obtained using computer simulations on models that are said to belong to the Villain-Lai-Das Sarma class (VLDS), suggest that the global roughness exponent is distinct from the local roughness exponent, which may lead to conclusions on which asymptotic anomalous scale exists in the VLDS class. Such feature may be justified by the global roughness exponents larger than the unit. In this thesis, we introduce a method for measuring local height fluctuations in interface, based on calculating the shortest distance from a profile point to a polynomial of degree adjustment n . The method is named the Optimal Fluctuations Analysis. (ODFA $_n$). We make a comparison with the method based on Detrended Fluctuations Analysis (DFA $_n$) and the standard local roughness method (DFA $_0$). The goal is to extract the local roughness exponent about profiles/surfaces generated by network models deposition, namely: Growth in a Restricted Solid-on-Solid model (CRSOS), (Das Sarma and Tamborenea-DT) and (Clarke Vvedensky-CV), believed to belong the VLDS class. We observe that these models present a transient regime in which profiles/surfaces have characteristic length (hill structures). For estimate the average lateral length of the hills, the value of the first zero or minimum of the normalized height-height auto-correlation function was used. Our results for the local roughness exponent extracted with the ODFA $_n$ method are compatible with the calculated exponent, using the group renormalization theory with first and second loop corrections for the VLDS class. For the CRSOS and DT models, the latter considering a situation where the noise reduction technique is applied in $d = 1$ dimensions and for the CV model, with $d = 1.2$ dimensions, we will use a polynomial adjustment with $n = 1.2$. A better scaling is observed for $n = 2$, where the effective local roughness exponents were extracted to scale lengths of the same order as the average lateral length of the hills. In the CV model at $d = 2$, an anomalous scale transient was investigated for small scales, calculating local roughness. Because it is a more realistic model for thin film growth simulation, we also study the distribution of the average number of steps, N_p , of surface adsorbed atoms with the CV model, as a function of the parameters R and ϵ , where R is the ratio between the diffusion rate, D_0 (considering atoms without side neighbors) is the deposition rate F , and ϵ is the parameter associated with the probability of detachment of atoms with their lateral neighbors. Our results show distributions in the form of extended exponentials under the low temperature regime. In the high temperature regime our results indicate that the average number of steps scales with $R\epsilon^2$, suggesting

that when detachment from kink sites becomes possible, there is a large amount of displacement of atoms that control N_p .

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

A fabricação de filmes finos utilizando a técnica de epitaxia por feixe molecular (*Molecular Beam Epitaxy*-MBE) [2, 3] é de alta relevância, devido à sua capacidade de manufaturar diferentes dispositivos, como células solares [4], detectores [5], nanofios [6] e transistores [7], em que se utilizam materiais como, por exemplo, CdSe, CdTe, Ge, GaAs, InAs, InP, Si e ZnSe [8–12]. Além disso, as principais características que diferenciam a MBE de outras técnicas de crescimento são a reprodução precisa de todos os parâmetros envolvidos durante o processo epitaxial, o crescimento em condições fora do equilíbrio termodinâmico, e a possibilidade de controlar a evolução cinética das camadas externas do filme epitaxial [13]. A qualidade do filme exige que cada monocamada seja formada antes da próxima, em condições fora do equilíbrio [13, 14], que é alcançado com a alta mobilidade dos átomos na interface. Temperaturas suficientemente altas, dão como resultado superfícies que podem ser lisas com rugosidade global não superior a poucos nanômetros correspondendo a uma ou duas monocamadas. Para analisar as topografias das superfícies produzidas por MBE, técnicas como Microscopia de Força Atômica (*Atomic Force Microscopy*-AFM) [15] e Microscopia de Varredura por Tunelamento (*Scanning Tunneling Microscopy*-STM) [16] são frequentemente usadas. Destaca-se que para a técnica AFM, deve-se ter atenção ao tamanho finito da ponta, que limita uma resolução completa dos vales mais profundos e dos platôs inclinados [17, 18]. Com estas duas técnicas é possível conseguir resoluções da ordem de escala atômica. Algumas superfícies crescidas com a técnica MBE apresentam estrutura com forma de morros, como pode ser visto na Fig. 1.1 [19]. No entanto, estas estruturas com forma de morro podem aumentar seu tamanho à medida em que a espessura do filme é aumentada, como pode ser observado na Fig. 1.2 [20]. Além disso, a literatura vem reportando investigações, onde a presença de morros é observada, como podemos ver nas Refs. [9, 13, 21, 22].

Na atualidade, há uma tendência a produzir-se materiais bidimensionais de alta qualidade de uma única camada de átomos. Nestes materiais, faz-se importante compreender o papel da difusão dos átomos nos terraços e perímetros dos aglomerados que possuem diferentes formas, a saber: dendríticas, compactas, irregulares, poligonais. Desta maneira, permite-se uma construção molecular com precisão atômica, o que facilita a criação de nanofitas sem defeitos e redes moleculares complexas tipo 2D [23]. A produção destes materiais leva à construção de células fotovoltaicas [24], electrodos [25] e purificadores de água [26]. No entanto, para manufaturar estes materiais provavelmente serão usadas as

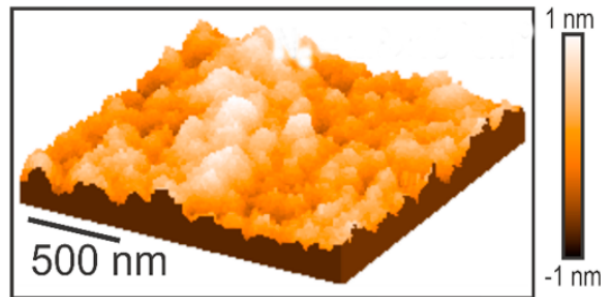


Fig 1.1: Imagem obtida via AFM quando GaAs é depositado em um substrato de GaAs $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$.

Figura extraída e modificada da referência [19]

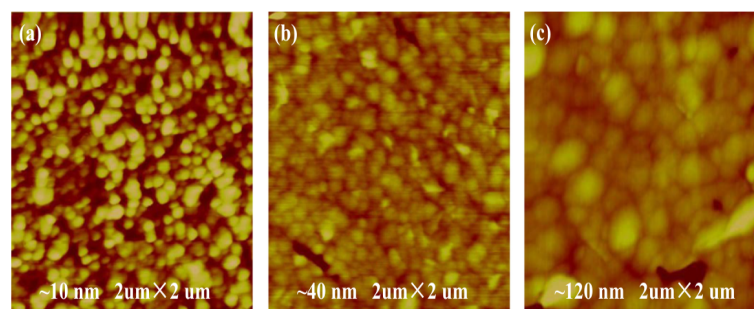


Fig 1.2: Imagens obtidas via AFM dos filmes CdTe com diferentes espessuras: (a) ~ 10 nm, (b) ~ 40 nm e (c) ~ 120 nm.

Figura extraída da referência [20]

técnicas: *On-Surface Synthesis-OSS*, a qual possibilita a montagem de baixo para cima de estruturas moleculares a partir de seus constituintes moleculares [27] e a deposição de vapor químico (*Chemical Vapor Deposition-CVD*) [28]. O ingrediente dominante destas técnicas é a difusão dos átomos no substrato/filme. Desde uma abordagem computacional, existem dois parâmetros que permitem relacionar o número médio de passos usando o modelo CV, quais sejam: R e ϵ , onde R é a razão entre a taxa de difusão, D_0 , e a taxa de deposição, F , ($R \equiv D_0/F$) e o ϵ parâmetro associado ao deslocamento com um certo número de vizinhos laterais. Motivados a entender como o número médio de passos está relacionado com estes parâmetros, realizamos um estudo em multicamada, no qual medimos distribuições de número médio de passos para diferentes valores do parâmetro $\Upsilon = \log_{10}(R\epsilon^4)$. Além disso, realizamos um colapso do número médio de passos, isto é, um aporte para chegar à compreensão do papel da difusão na fabricação de materiais.

Para estudar a dinâmica das interfaces nas superfícies, também são considerados os modelos teóricos baseados em equações estocásticas [29–34]. Simulações computacionais usando modelos de rede permitem melhorar a compreensão do que acontece durante a dinâmica de crescimento do filme [13, 35, 36]. Estes modelos conseguem reproduzir características dos sistemas físicos, sendo uma ferramenta de muita utilidade. Neles, pode-se incluir processos físicos que são considerados relevantes. Os métodos computaci-

onais facilitam a atribuição de valores em parâmetros de difícil acesso em experimentos, possibilitando obter um alto número de amostras e tempos de simulação da deposição longos. Ademais, são ferramentas poderosas que permitem acessar superfícies com características similares às alcançadas via experimentos, como pode ser visto na Fig. 1.3. Durante o processo de crescimento de filmes finos, por meio de métodos experimentais ou simulação computacional, é possível observar que estes possuem algumas quantidades em comum, como covariâncias espaciais e temporais, distribuições de altura, distribuições de rugosidade quadrática local, mesmo conjunto de expoentes de escala, entre outras. Isto leva a concluir que, apesar, das diferenças que existem entre os processos microscópicos, durante o crescimento, estes formam diferentes interfaces, que possuem propriedades estatísticas semelhantes, podendo ser classificadas dentro da mesma classe de universalidade, permitindo ignorar diversos detalhes. Destaca-se então a importância das simetrias e conservações implicadas na dinâmica de formação das interfaces. Porém, é relevante investigar-se acerca da universalidade, que leva a melhorar a compreensão sobre as interfaces. As investigações da dinâmica de escala para superfícies rugosas em modelos que evidenciam ser descritos pela classe de universalidade Villain-Lai-Das Sarma (VLDS) [31, 32, 37–41], também conhecida como epitaxia por feixe molecular não linear (nMBE), são reportados, por exemplo, nas Refs. [42–46]. A equação VLDS foi investigada, sob o conceito de renormalização de grupo [47–49], e muitas características observadas têm sido esclarecidas em simulações de cinética Monte Carlo. Estudos numéricos sobre modelos tipo VLDS, como *Das Sarma and Tamborenea*-DT [50] e sólido sobre sólido conservativo (*Conserved Growth in a Restricted Solid-on-Solid model*-CRSOS) [51, 52], são reportados expoentes de escala para rugosidade global $\alpha = 0.94 \pm 0.02$ e dinâmico $z = 2.88 \pm 0.04$ em 1+1 dimensões. Além disso, são calculados os momentos W_n , para as distribuições de alturas [53]. Investigações sobre modelos de rede da classe VLDS consideram que as flutuações de escala locais e globais possuem diferentes expoentes de rugosidade locais e globais o que poderia indicar escala anômala [54, 55]. Contudo, a escala normal foi relatada para esta classe tanto teoricamente [55], como numericamente, em processos de crescimento local [56]. Em experimentos, a formação de morros têm sido aproveitada para justificar a existência de escala anômala [57], enquanto a interação entre a tensão não-local e a desordem do substrato foram apontadas como o mecanismo envolvido na escala anômala no crescimento epitaxial dos filmes de CdTe semicondutores [58, 59]. A escala anômala foi então relatada em análises teóricas do crescimento epitaxial da superfície e integração numérica da equação VLDS para 1+1 e 2+1 dimensões [60].

Outros trabalhos em que investigou-se a classe VLDS, a saber: rugosidade local no modelo *Clarke Vvedensky*-CV em 2+1 dimensões [61, 62] e um transiente de escala anômala foi encontrado [63], distribuições de rugosidade local quadrática utilizando o modelo CRSOS [64], distribuições de alturas, covariâncias espaciais e temporais sobre os modelos CRSOS e DT [65]. No entanto, para o modelo DT expoentes de rugosidade local sem aplicar a técnica de redução de ruído [66] e em que esta é aplicada [67, 68] para 1+1 dimensões, onde foi reportado expoentes distintos dos expoentes de rugosidade global calculados, usando a teoria de renormalização de grupo (RG) com correções de primeiro e segundo laço para equação VLDS, sugerindo a presença de escala anômala [43, 69]. Ademais, distribuições de rugosidade local [56] apontam que este modelo possui escala normal em 1+1 dimensões. Estes resultados insinuam que este modelo é controverso.

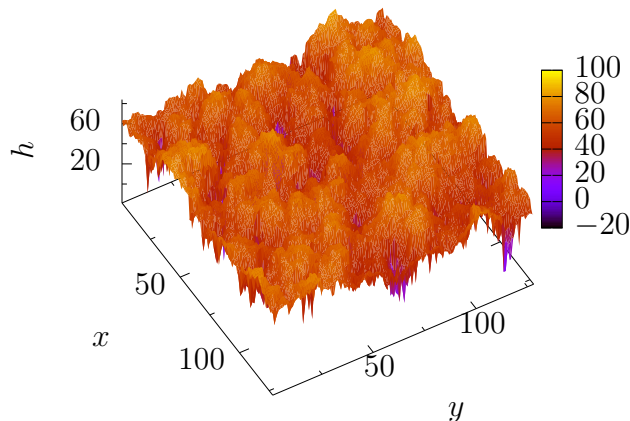


Fig 1.3: Superfície gerada via simulação computacional com o modelo CV.

Motivados pelos resultados reportados na literatura que não dão clareza do porquê da diferença que existe entre os expoentes de rugosidade global e local em modelos que se acreditam pertencer à classe VLDS, nós introduziremos um método para avaliar o expoente de rugosidade local. Nosso método consiste em analisar as flutuações de altura, calculando a menor distância de um ponto do perfil até um polinômio ajuste de grau n , dentro de uma janela de tamanho lateral l . A este método denominaremos Análise Ótimo de Flutuações Destendenciadas (ODFA $_n$). O ODFA $_n$ é comparado com o método que utiliza a Análise de Flutuações Destendenciadas (DFA $_n$) [70] e o método padrão, que são usados para calcular a rugosidade local. Os modelos empregados para este propósito são: CRSOS e DT em 1+1 dimensões e CV tanto para $d + 1$ com $d = 1, 2$ dimensões, neste último caso são utilizados valores de R baixos com o propósito de encontrar rugosidade superficial alta. Os expoentes de rugosidade efetivos extraídos com ODFA $_n$ são próximos dos preditos pela teoria RG para a classe VLDS nos modelos investigados. Além disso, o expoente de rugosidade local extraído com o método ODFA $_2$ para o modelo DT fornece a primeira evidência para este modelo, sem aplicar a técnica de redução de ruído.

Finalmente, esta tese é organizada da seguinte maneira: no capítulo 2, apresentam-se os diferentes métodos utilizados para extrair o expoente de rugosidade local, e descreve-se os diversos modelos que se acreditam pertencer à classe VLDS. No capítulo 3, expõem-se os resultados obtidos para $d + 1$ com $d = 1, 2$ dimensões com suas respectivas discussões. Ademais, os resultados para o número médio de passos e sua respectivas discussões. No capítulo 4, apresentam-se as conclusões finais e perspectivas. Esta tese contém quatro apêndices nos quais discutiremos a equação VLDS, o modelo de etching, o algoritmo de lista usado para o modelo CV, os artigos desenvolvidos durante a tese por último, encontra-se as referências bibliográficas utilizadas nesta tese.

Capítulo 2

MÉTODOS PARA DETERMINAR EXPOENTES DE RUGOSIDADE LOCAL E MODELOS DISCRETOS DA CLASSE VLDS

Neste capítulo, descreveremos gradezas que são usadas para explicar o crescimento de interfaces em condições fora do equilíbrio. Uma destas quantidades é a rugosidade global, que é utilizada para determinar o conjunto de expoentes de escala que descrevem o crescimento da interface. Descreveremos a função de auto-correlação altura-altura, com o propósito de verificar se as superfícies investigadas, são auto-afins ou se possuem comprimento característico. Em seguida, apresentaremos diferentes métodos que são utilizados para descrever flutuações locais e determinar o expoente de rugosidade local, a saber: rugosidade padrão e análise de flutuações destendenciadas (*Detrended Fluctuation Analysis*-DFA); e introduziremos o método de análise ótima de flutuações destendenciadas (ODFA). Finalmente, apresentaremos modelos conservativos, que se dizem pertencer à classe VLDS e suas regras de deposição.

2.1 Rugosidade Global

No processo de crescimento de superfícies em situações fora do equilíbrio, seja em uma perspectiva experimental ou mediante simulação computacional via modelos discretos, obtemos flutuações de altura da interface, que evoluem no tempo, caracterizando, assim, o enrugamento cinético. Uma grandeza usada para quantificar estas flutuações é a rugosidade global $\omega(L)$, que mede a largura característica da interface, definida como o desvio padrão das alturas e descrita pela equação:

$$\omega(L, t) = \left\langle \overline{h(x, t)^2} - \left(\overline{h(x, t)} \right)^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}}, \quad (2.1)$$

onde h corresponde à altura, \bar{h} à altura média do perfil, x é a posição, e t ¹ o tempo. A linha superior representa a média espacial sobre todo o sistema de tamanho L e $\langle \dots \rangle$ refere-se à média sobre várias amostras independentes. Para uma dinâmica auto-afim, a rugosidade global (Eq. 2.1) apresenta um regime de crescimento para $t \ll t_x$, onde inicialmente este é descorrelacionado até um tempo t_0 ; depois deste tempo existem correlações na interface até atingir um valor constante para $t \gg t_x$, onde t_x é conhecido como tempo de *crossover*, como é observado na Fig. 2.1a. No regime de crescimento, $\omega(L, t)$ escala com o tempo, obedecendo à seguinte lei de potência:

$$\omega(L, t) \sim t^\beta, \quad (2.2)$$

em que β é denominado **expoente de crescimento**, que é extraído no intervalo $t \ll t_x$. Inicialmente, as partículas depositadas sobre o substrato estão descorrelacionadas, portanto, β assume um valor próximo de 1/2. Quando as correlações na interface começam a ter presença, o valor de β depende da classe de universalidade à qual pertence o modelo investigado (ver na Fig. 2.1b). Para tempos suficientemente longos, um regime de saturação é observado, justificado pelo fato de que as correlações propagadas pela relaxação da superfície produzem um comprimento de correlação ξ , que cresce paralelo ao substrato à medida que novas partículas são acrescentadas à superfície. Quando $\xi \sim L$, o sistema se torna totalmente correlacionado. O valor constante da rugosidade $\omega(L, t)$ tem uma dependência com o tamanho lateral do sistema L (ver Fig. 2.1b) e obedece à lei de potência dada pela expressão:

$$\omega_{sat}(L, t) \sim L^\alpha, \quad (2.3)$$

onde α é conhecido como **expoente de rugosidade global**, obtido para $t \gg t_x$. A figura 2.1c mostra a dependência de ω_{sat} com o tamanho lateral do sistema.

O comprimento de correlação ξ cresce à medida que o tempo de deposição aumenta e escala como $\xi \sim t^{1/z}$, em que z , é chamado de **expoente dinâmico** [35]. Portanto, a transição para o regime de saturação sucede em um tempo t_x , levando a intuir que este tem dependência com o tamanho lateral do sistema L , obedecendo à seguinte lei de potência:

$$t_x \sim L^z. \quad (2.4)$$

Tal dependência é ilustrada na Fig. 2.1d.

No entanto, os expoentes de escala anteriormente descritos não são independentes. Para mostrar a conexão entre eles, consideramos a rugosidade global próxima ao ponto de saturação. No limite pela esquerda, temos que $\omega \sim t_x^\beta$ e à direita $\omega_{sat} \sim L^\alpha$. Recordando que $t_x \sim L^z$ obtém-se

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (2.5)$$

A dependência de $\omega(L, t)$, com t e L , é descrita pelas equações 2.2 e 2.3, podendo-se combinar em uma expressão, representando a dinâmica de escala

¹Onde definimos $\Delta t = 1/L^d$, sendo L o tamanho lateral do sistema e d a dimensão. Portanto, definimos o tempo como: $t = \sum_i \Delta t_i$.

$$\omega(L, t) = L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (2.6)$$

conhecida como a relação de escala de Family-Vicsek (FV) [35, 71] e válida para escala normal da rugosidade. Na seção 2.3, mostramos que esta relação também é válida para flutuações locais da interface. No limite em que o argumento da função de escala $f(x)$ é pequeno, a rugosidade global apenas depende de t . A relação 2.6 deve escalar como a equação 2.2. Isto implica que para $x \ll 1$, a função de escala $f(x)$ tem que ser $f(x) \sim x^\beta$ e $f(x) \sim \text{const}$ para $x \gg 1$. Um colapso de curvas de rugosidade global, usando a relação de escala de FV é apresentado na Fig. 2.2. O modelo de deposição utilizado é CRSOS em 1 + 1 dimensões e suas regras são discutidas na seção 2.6.1. Reportes na literatura em que a relação de Family-Vicsek tem sido confirmada são: propagação do fluxo de fluido em um meio poroso [35], crescimento de cristais líquidos turbulentos [72–74] e combustão lenta de papel [75, 76].

Obter o conjunto de expoentes de escala permite classificar o sistema no que denomina-se classe de universalidade, onde podemos enquadrar a dinâmica de crescimento da interface de um filme. Esta é observada quando a evolução da morfologia de sistemas distintos é descrita pelos mesmos conjuntos de expoentes de escala e distribuições de altura. Estas diferenças são observadas em modelos de rede, por exemplo, o modelo de erosão (*Etching*) [77], em que suas regras de deposição das partículas no substrato/filme são distintas quando comparadas com as do modelo de crescimento sólido sobre sólido restritivo (*Restricted Solid-on-Solid Model-RSOS*) [78]. O conjunto de expoentes encontrados nestes modelos são classificados dentro da mesma classe de universalidade, chamada Kardar, Parisi e Zhang KPZ [29], sugerindo que os expoentes de escala não dependem dos detalhes microscópicos do sistema investigado [79]. Outra quantidade usada para caracterizar a morfologia da superfície é a função de auto-correlação altura-altura, a qual é descrita em seguida.

2.2 Função de Auto-Correlação Altura-Altura

Esta quantidade é utilizada para descrever a morfologia da superfície e sua dinâmica, a qual é definida como [80]:

$$\Gamma(r, t) = \langle \tilde{h}(r_0 + r, t) \tilde{h}(r, t) \rangle, \quad (2.7)$$

onde $\tilde{h} = h - \bar{h}$, calculada sobre diferentes posições r_0 , \bar{h} definida antes na Eq. 2.1 e $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre diferentes amostras. A rugosidade global quadrática do sistema para um valor t é obtida da Eq. 2.7 quando $r = 0$, ou seja, $\omega^2 = \Gamma(0, t)$. A função Γ pode exibir diferentes comportamentos que dependem da morfologia do perfil/superfície como, por exemplo, para um perfil auto-afim, Γ tem um decaimento sem oscilações à medida que r aumenta, como se ilustra na Fig. 2.3a. No caso em que o perfil apresenta uma morfologia com comprimento característico, a função Γ exibe um decaimento e, em seguida, um comportamento oscilatório ao redor do eixo $\Gamma(r, t) = 0$, para $\Gamma > \xi$, em que ξ é o comprimento de correlação [81], como é mostrado na Fig 2.3c. Algumas superfícies crescendo em condições fora do equilíbrio podem exibir uma morfologia com morros [37, 82]. Pode-se estimar o tamanho característico médio dos morros usando o

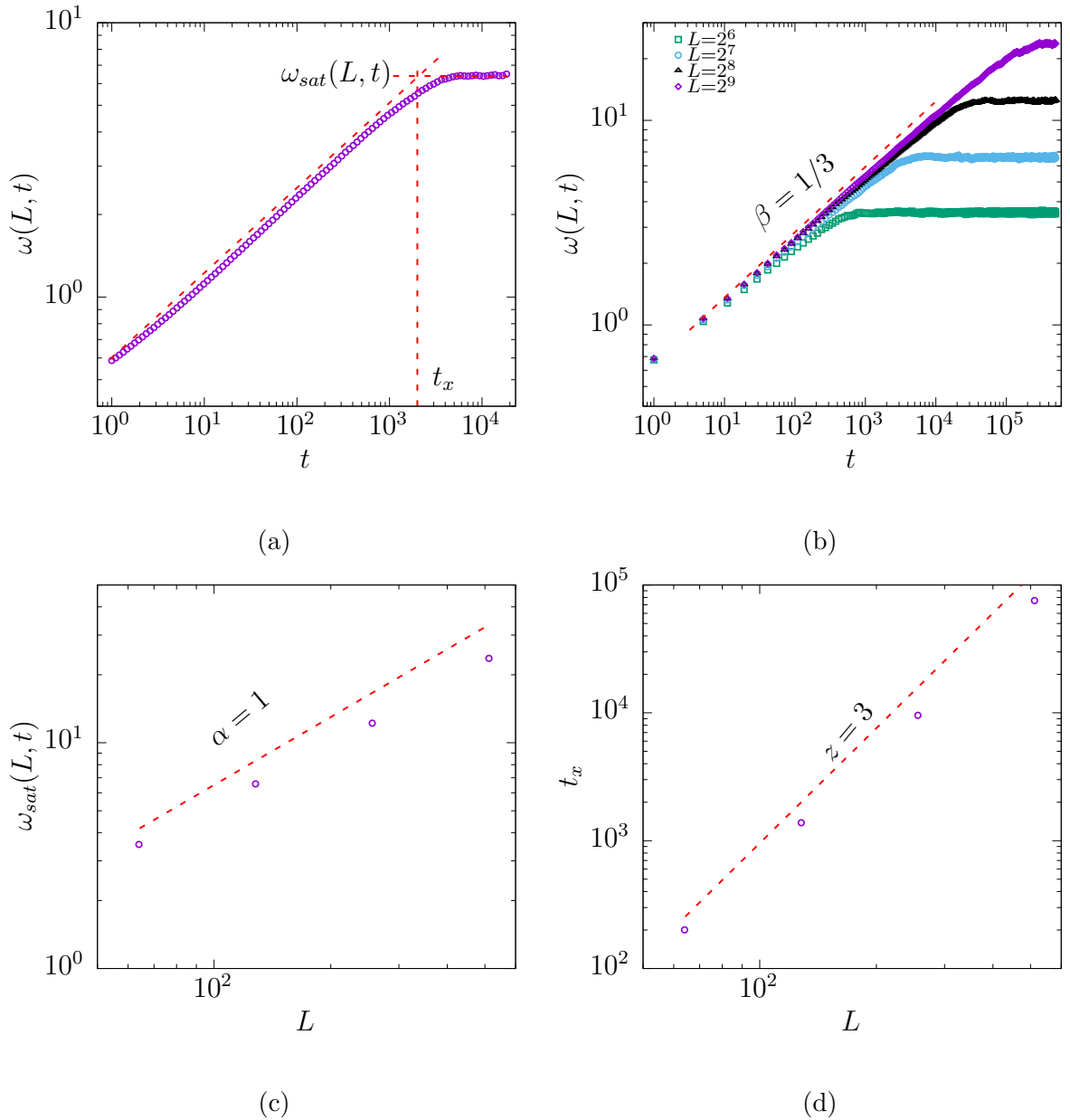


Fig 2.1: (a) Evolução da rugosidade global para uma dinâmica auto-afim: regime de crescimento ($t \ll t_x$) e saturação ($t \gg t_x$). (b) Ilustração do expoente β e a dependência de $\omega_{sat}(L, t)$ com tamanho lateral L . (c) e (d) Dependência dos expoentes α e z com o tamanho lateral do sistema L . Utilizamos o modelo CRSOS em 1 + 1 dimensões, com 800 realizações independentes. A linha tracejada indica os expoentes esperados para a correspondente classe de universalidade.

primeiro zero (ξ_0), ou primeiro mínimo (ξ_m), na função Γ [13, 38, 64] e é esperado escalar como:

$$\xi_{0,m} \sim t^{1/z_c}, \quad (2.8)$$

no qual z_c é conhecido como o expoente de *coarsening*. Para superfícies auto-afins, tal expoente corresponde ao expoente dinâmico, definido na Eq. 2.4. Este expoente é mostrado

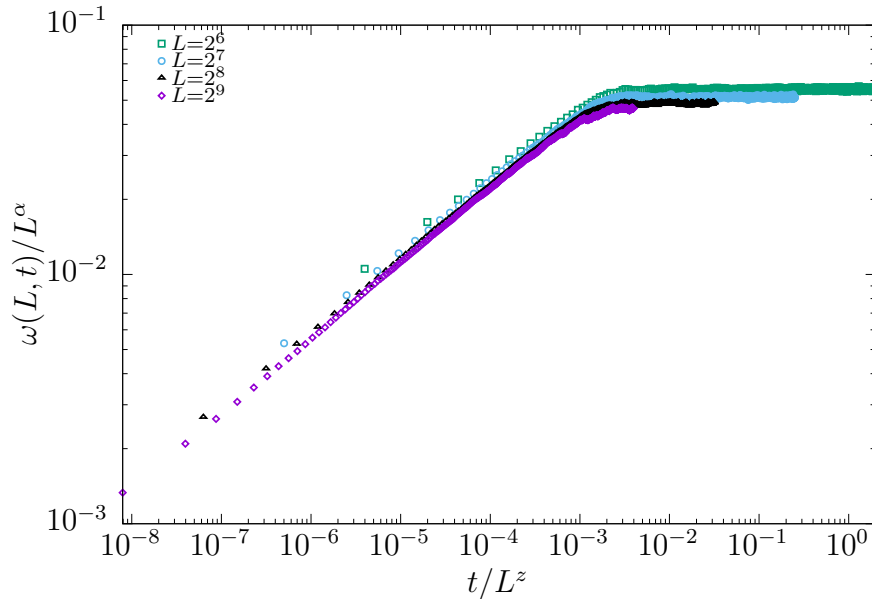


Fig 2.2: Colapso de curvas de rugosidade global usando a relação de FV, para o modelo CRSOS em 1 + 1 dimensões, onde $\alpha = 1$ e $z = 3$ para 800 realizações independentes.

nos “insets” das Figs. 2.3a e 2.3c, tanto para um crescimento auto-afim, como para uma morfologia que exhibe estrutura de morros. Na próxima seção, descreveremos um método que permite extrair expoentes locais.

2.3 Rugosidade Local Padrão

A relação de escala de FV (Eq. 2.6) para o crescimento de interfaces auto-afins determina que características estatísticas do sistema não devem mudar quando são analisadas em diferentes escalas, ou seja, significa dizer que analisar o sistema em grandes escalas de observação ($l \sim L$) ou pequenas escalas ($l \ll L$) levam a semelhanças do ponto de vista estatístico. No entanto, alguns resultados experimentais [83] e de modelos teóricos [84] evidenciam que esta relação não é satisfeita. Para conseguir um melhor entendimento do porquê destas características lança-se mão de flutuações locais superficiais. Para tal propósito, definimos uma expressão para descrever flutuações da interface dentro de uma janela i , com tamanho lateral l , como:

$$\omega_i^2(l, t) = \langle h^2 \rangle_i - \langle h \rangle_i^2, \quad (2.9)$$

onde $\langle \dots \rangle_i$ é uma média sobre a janela i . A rugosidade local quadrática da interface $\omega^2(l, t)$, é calculada como uma média de ω_i^2 sobre diferentes janelas e amostras para um t fixo. Nesta tese, denotaremos a rugosidade padrão como DFA_0 . Nas próximas seções, descreveremos o método DFA e introduziremos um método baseado em calcular a mínima distância entre um ponto no perfil/superfície até um polinômio de ajuste, para caracterizar flutuações locais, sendo DFA_0 um caso particular dos métodos a ser nomeados. DFA_0 pode ser usado para extrair o expoente α , em vez de calcular a rugosidade global do sistema. Ademais, verificando-se escala normal da rugosidade superficial, a rugosidade local segue

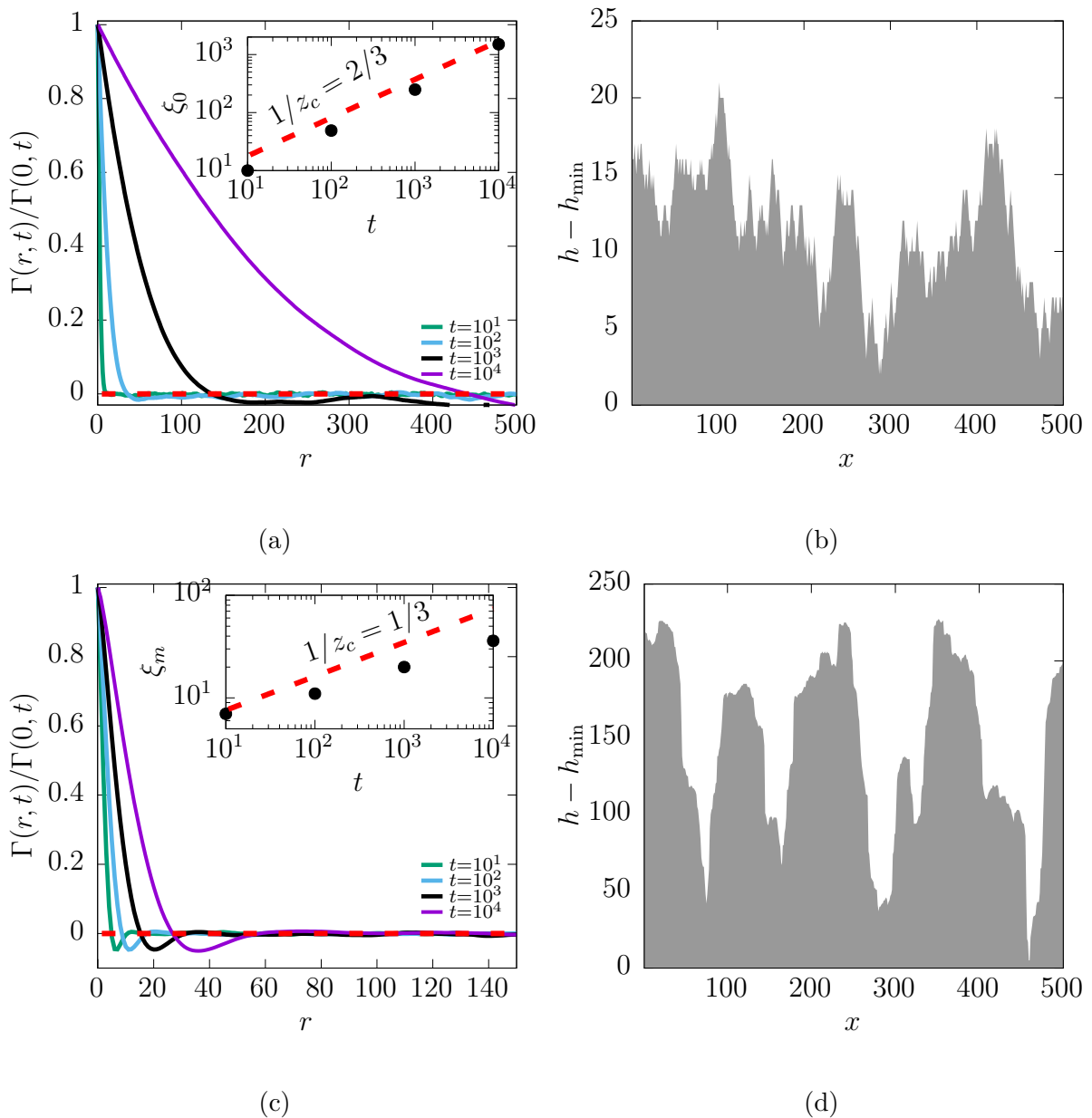


Fig 2.3: (a) Função de auto-correlação altura-altura normalizada para um perfil auto-afim, considerando o modelo RSOS em 1 + 1 dimensões com tamanho lateral $L = 10^3$. (b) Segmento de um perfil auto-afim para $t = 10^4$ no modelo RSOS. (c) Função de auto-correlação altura-altura para um perfil com comprimento característico: modelo DT em 1 + 1 dimensões com tamanho lateral $L = 2^{14}$. (d) Segmento de um perfil com comprimento característico no modelo DT em $t = 10^5$. Os “insets”(a) e (c) mostram a evolução de $\xi_{0,m}$ como função de t .

a relação de escala de FV [71] mediante a expressão

$$\omega(l, t) = t^\beta f\left(\frac{l}{t^{1/z}}\right), \quad (2.10)$$

onde $f(x) \sim x^\alpha$, para $x \ll 1$ e $f(x) = \text{const.}$ para $x \gg 1$. Portanto, ω escala com o tempo em $\omega \sim t^\beta$, para $t \ll l^z$ e $\omega \sim l^\alpha$ para $t \gg l^z$, como é ilustrado na Fig. 2.4. No entanto, a Eq. 2.10, para o caso no qual não há escala normal (escala anômala) [85], $f(x)$ muda para $f_{\text{ano}}(x)$, em que $f_{\text{ano}}(x) \sim x^{\alpha_{\text{loc}}}$, para $x \ll 1$ e $f_{\text{ano}}(x) = \text{const.}$, para $x \gg 1$ e $\omega(l, t) \sim l^{\alpha_{\text{loc}} t^\kappa}$, em que κ é o expoente anômalo [59, 63] e $\kappa = (\alpha - \alpha_{\text{loc}})/z$, relações válidas em pequenas escalas. Quando as flutuações locais possuem propriedades diferentes das globais, a rugosidade é identificada como rugosidade anômala, levando a superfícies não auto-afins [86]. Ademais, os expoentes de rugosidade globais diferem dos locais, ($\alpha_{\text{loc}} \neq \alpha$) [87]. Inicialmente, o termo anômalo foi usado para descrever crescimento de interfaces que possuíam expoentes globais α maiores ou iguais a 1. Superfícies com este comportamento são consideradas super-rugosas [88–90]. A literatura reporta a presença de rugosidade anômala em modelos de crescimento em que existem desordem [91], modelos de deposição eletroquímica [84] e deposição química por vapor [92]. As primeiras investigações a dar indícios de que a relação de FV não era satisfeita [44, 93] foi reportada, no modelo Wolf-Villain em 1 + 1 dimensões. Posteriormente, foi observado em modelos de crescimento lineares e não-lineares que são dominados por difusão [43, 86, 88]. A partir daí, tratamentos analíticos e numéricos foram fortemente dedicados a esta questão, levando às seguintes conclusões: (i) há três classes de anomalia: facetada [54], intrínseca e super-rugosa [85]; (ii) o valor de $\alpha < 1$ não é condição suficiente para determinar a existência de escala anômala no modelo investigado [86]; (iii) modelos conservativos exibem escala anômala [54]. Atualmente, há várias formas de escalonamento que são utilizadas para representar a dinâmica das flutuações locais no crescimento da interface em uma superfície. Portanto, a relação de FV tornou-se um caso particular em que não existem diferenças entre os expoentes α_{loc} e α [87]. Esta hipótese foi verificada em diferentes experimentos, alguns destes são: dissolução de metais (ferro puro) [94] e fratura de superfícies [95]. Na seguinte seção se faz a descrição do método de análise de flutuações destendenciadas, como ferramenta para extrair o expoente de rugosidade local.

2.4 Rugosidade Local com Análise de Flutuações Destendenciadas

O método de análise de flutuações destendenciadas (*Detrended Fluctuations Analysis*-DFA) foi proposta por C. K. Peng *et al.* [70], como ferramenta para o tratamento de sinais não estacionários, com a finalidade de caracterizar correlações de longa escala. Por meio desta técnica, evita-se a detecção de falsas correlações não estacionárias [70]. O método tem como objetivo, portanto, eliminar as tendências locais, dentro de cada janela não sobreposta, por meio de um ajuste polinomial da série investigada, como é observado nas Figs. 2.5a e 2.5b. Isto permite estudar os dados da série destendenciada. Algumas pesquisas onde DFA é utilizado como técnica sobre perfis auto-afins, são reportadas nas referências [96, 97].

Nesta tese, consideraremos o método padrão DFA com janelas sobrepostas como mecanismo para determinar o expoente de rugosidade local. O cálculo das flutuações da interface dentro de uma janela i de tamanho lateral l , através de DFA_n , em que n representa o grau do polinômio de ajuste, é descrita pela equação:

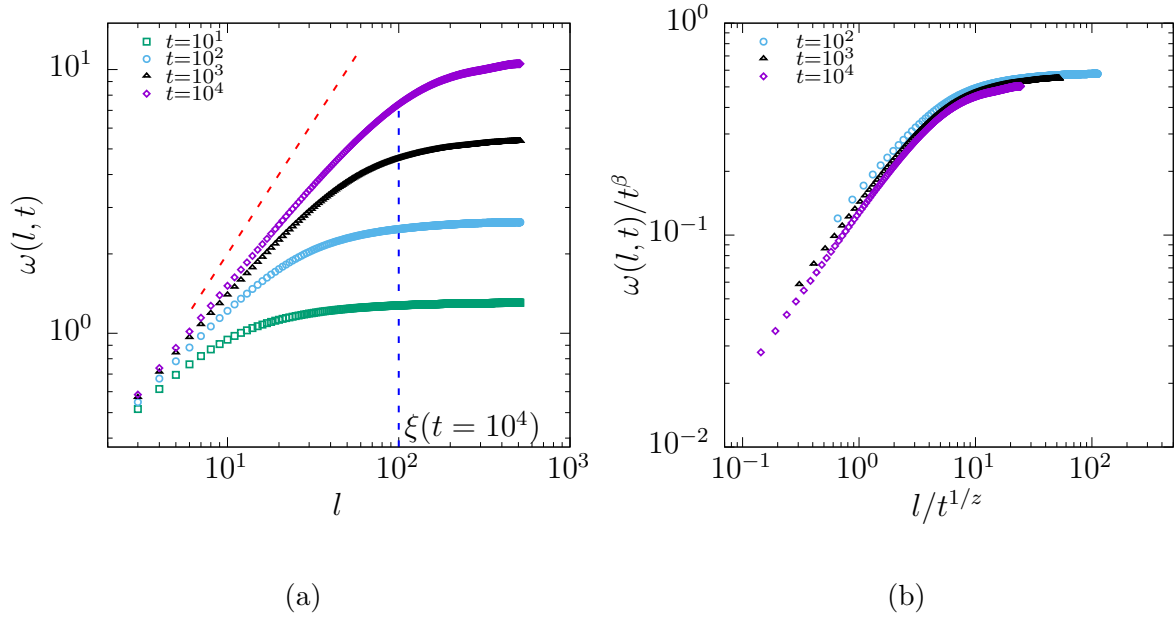


Fig 2.4: (a) Evolução da rugosidade local para um regime de crescimento $t \ll l^z$ e saturação $t \gg l^z$ no modelo CRSOS em 1 + 1 dimensões com tamanho lateral de $L = 2^{14}$. A linha tracejada vermelha indica o valor esperado do expoente de rugosidade local da classe de universalidade. (b) Colapso de curvas de rugosidade local usando a relação de FV. A simulação foi realizada utilizando 100 realizações independentes.

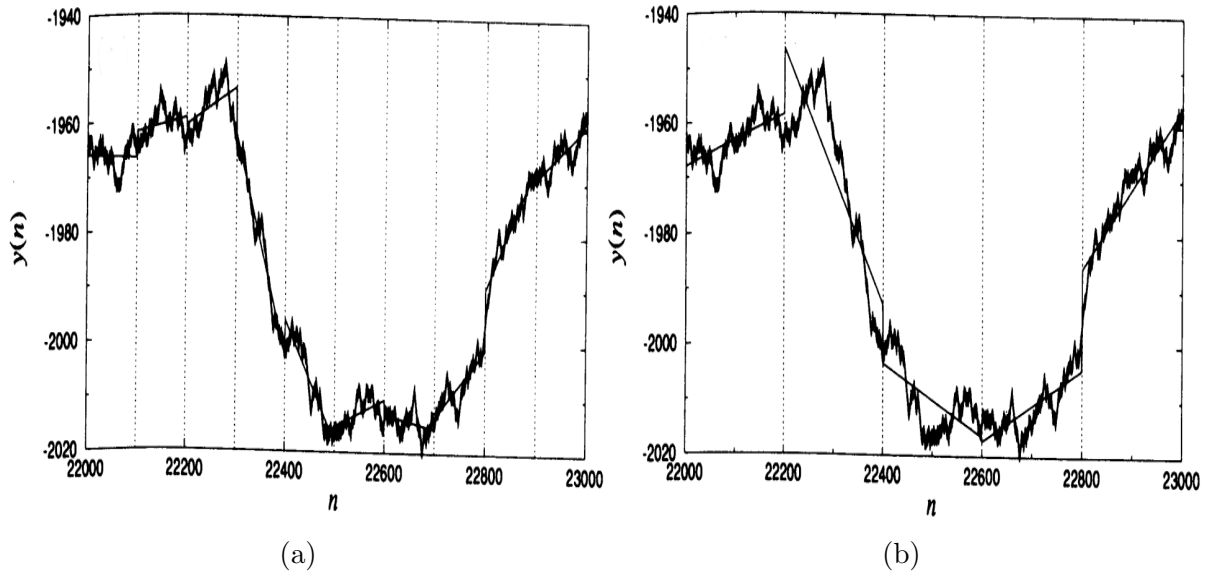


Fig 2.5: Ilustração do método DFA aplicado numa série. Tendências locais em janelas de tamanho lateral 100 e 200 são mostradas em (a) e (b), respectivamente.

Figura retirada da Ref: [70]

$$\omega_i^{(n)} = \langle (\delta^{(n)})^2 \rangle^{1/2}, \quad (2.11)$$

onde $\delta^{(n)}$ representa a distância, perpendicular a $h = 0$, de um ponto no perfil de coordenadas (x_0, h_{x_0}) , até o polinômio de ajuste G_i (ver Fig 2.6), com coeficientes $A_i^{(0)}, A_i^{(1)}, \dots, A_i^{(n)}$, obtidos através de mínimos quadrados dentro da janela i de tamanho lateral l [98]. Matematicamente, $\delta^{(n)}$ pode ser representado pela equação:

$$\delta^{(n)} = h(x) - G_i(x; A_i^{(0)}, A_i^{(1)}, \dots, A_i^{(n)}). \quad (2.12)$$

A rugosidade local ω^n , com este método, obtém-se, considerando a média sobre diferentes tamanhos de janela e amostras. Aqui $h(x)$ é a altura do perfil com referência $h = 0$. A rugosidade local padrão (DFA₀) é alcançada quando:

$$G_i = A_i^{(0)} = \langle h \rangle_i. \quad (2.13)$$

Na próxima seção, introduziremos um método para calcular a rugosidade local, fundamentado em determinar a mínima distância de um ponto no perfil, até um polinômio de ajuste.

2.5 Rugosidade Local com Análise Ótima de Flutuações Destendenciadas

Para o caso da análise ótima, a rugosidade local é definida da mesma maneira que a Eq. 2.11, com δ^n dado por:

$$\delta^{(n)} = \min \left[h(x) - G_i \left(x; A_i^{(0)}, A_i^{(1)}, \dots, A_i^{(n)} \right) \right], \quad (2.14)$$

onde “min” faz menção à distância mínima de um ponto no perfil de coordenadas (x_0, h_{x_0}) até G_i . Para se obter a distância mínima, é utilizado o conceito de distância entre dois pontos em um plano, dada por

$$r^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2, \quad (2.15)$$

onde r^2 é a distância quadrática entre dois pontos, cujas coordenadas no plano são representadas por (x_0, y_0) e (x, y) . Para este caso, $r^2 = (\delta^{(n)})^2$, $y_0 = h_{x_0}$ e $y = G_i$. Por tanto a Eq. 2.15 torna-se:

$$(\delta^{(n)})^2 = (x - x_0)^2 + (G_i - h_{x_0})^2. \quad (2.16)$$

Em seguida, discutiremos três casos deste método.

Caso 1 : $G_i = A_i^{(0)}$.

Aqui G_i é de grau zero, portanto, este é igual à média dentro de uma janela i de tamanho l , isto é, $A_i^{(0)} = \langle h \rangle_i$. Assim

$$(\delta^{(0)})^2 = (h_x - \langle h \rangle_i)^2, \quad (2.17)$$

levando a concluir que o método DFA₀ é recuperado.

Caso 2 : $G_i = A_i^{(0)} + A_i^{(1)}x$.

Neste caso, a Eq. 2.16 torna-se:

$$(\delta^{(1)})^2 = (x - x_0)^2 + (G_i - h_{x_0})^2, \quad (2.18)$$

em que a distância mínima desde (x_0, h_{x_0}) até G_i é encontrada minimizando a Eq. 2.18 $\frac{\partial((\delta^{(1)})^2)}{\partial x} = 0$. Realizando a derivação e efetuando algumas manipulações algébricas, encontra-se que:

$$Ax + B = 0, \quad (2.19)$$

onde, $A = 1 + (A_i^{(1)})^2$ e $B = A_i^{(0)}A_i^{(1)} - A_i^{(1)}h_{x_0} - x_0$. Portanto, a solução da Eq. 2.19, é $x = -B/A$, sendo esta solução única. Substituindo este resultado na Eq. 2.18, encontra-se a mínima distância de um ponto no perfil até G_i como:

$$(\delta^{(1)})^2 = (-B/A - x_0)^2 + (A_i^{(0)} - A_i^{(1)}B/A - h_{x_0})^2. \quad (2.20)$$

Tal distância é ilustrada na Fig. 2.6a. Uma alternativa para se obter este mesmo resultado é usando a equação:

$$(\delta^{(1)})^2 = [(h(x) - G_i) \cos(\theta_i)]^2, \quad (2.21)$$

onde $\theta_i = \text{atan}(A_i^{(1)})$.

Caso 3 : $G_i = A_i^{(0)} + A_i^{(1)}x + A_i^{(2)}x^2$.

Para este caso, a Eq. 2.16 converte-se em:

$$(\delta^{(2)})^2 = (x - x_0)^2 + (G_i - h_{x_0})^2. \quad (2.22)$$

Minimizando a Eq.: 2.22, encontramos que:

$$Ax^3 + Bx^2 + Cx + D = 0, \quad (2.23)$$

correspondendo a uma equação de grau 3, com coeficientes $A = 2(A_i^{(2)})^2$, $B = 3A_i^{(1)}A_i^{(2)}$, $C = (A_i^{(1)})^2 + 2A_i^{(0)}A_i^{(2)} - 2A_i^{(2)}h_{x_0} + 1$ e $D = A_i^{(0)}A_i^{(1)} - A_i^{(0)}h_{x_0} - x_0$, em que suas soluções são encontradas usando métodos numéricos, visando obter os zeros da Eq. 2.23. Nesta tese, utilizamos o método da bisseção [98]. Da Eq. 2.23, obtemos um conjunto de soluções da forma (x_1, x_2, x_3) e substituídos na Eq. 2.22, levando a um conjunto de distâncias da forma $\left[(\delta_1^{(2)})^2, (\delta_2^{(2)})^2, (\delta_3^{(2)})^2 \right]$, em que a distância mínima é encontrada deste conjunto como:

$$(\delta^{(2)})^2 = \min \left[(\delta_1^{(2)})^2, (\delta_2^{(2)})^2, (\delta_3^{(2)})^2 \right]. \quad (2.24)$$

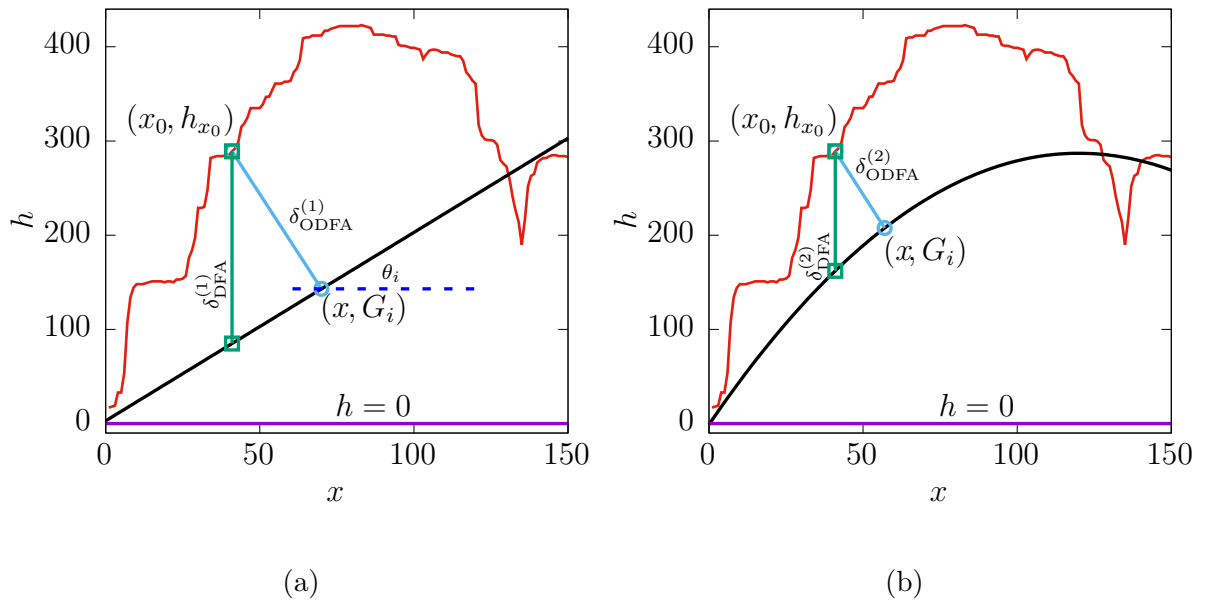


Fig 2.6: Ilustra a distância mínima desde um ponto do perfil de coordenadas x_0, h_{x_0} , até o polinômio de ajuste G_i : (a) ajuste polinomial de grau 1; (b) ajuste polinomial de grau 2.

Este método é introduzido nesta tese, denotado como ODFA_n [99]. Na Fig. 2.6b, pode-se ver a diferença entre a distância encontrada utilizando as equações 2.12 e 2.24, respectivamente. Apresentaremos um exemplo comparativo entre os métodos DFA_n e ODFA_n , com $n = 0, 1, 2$. Para tal fim, usamos o modelo de deposição CRSOS [51], em 1 + 1 dimensões que gera perfis com comprimento característico.

Os parâmetros empregados nesta simulação foram: tamanho lateral de $L = 2^{14}$, 1000 amostras independentes e $t = 10^6$. Em seguida, explora-se uma comparação de expoentes de rugosidade local efetivos por meio dos métodos DFA_n e ODFA_n , mais especificamente DFA_0 , DFA_1 , DFA_2 , ODFA_1 e ODFA_2 . Assim, o expoente de rugosidade local efetivo define-se como:

$$\alpha_{eff} \equiv \frac{d \ln(\omega^n)}{d \ln(l)}. \quad (2.25)$$

A figura 2.7 apresenta a evolução da rugosidade local como função de l para os diferentes métodos (Fig. 2.7a) e α_{eff} (Fig. 2.7b), observando-se que α_{loc} , extraído com DFA_0 , é menor quando comparado aos encontrados para $\text{DFA}_{1,2}$ e $\text{ODFA}_{1,2}$. Além disso, platôs maiores de α_{eff} são observados para estes últimos métodos (ver Fig. 2.7b), sendo estes aproximados ($\alpha_{eff}^{\text{DFA}_1} \sim \alpha_{eff}^{\text{ODFA}_1}$ e $\alpha_{eff}^{\text{DFA}_2} \sim \alpha_{eff}^{\text{ODFA}_2}$). Isto é justificado, pois as diferenças entre $h_i - h_{i+1}$ são pequenas, sabendo que i é a posição onde a partícula é depositada e $i + 1$ seu primeiro vizinho lateral. Na próxima seção, descreveremos modelos discretos que se acreditam pertencer à classe VLDS.

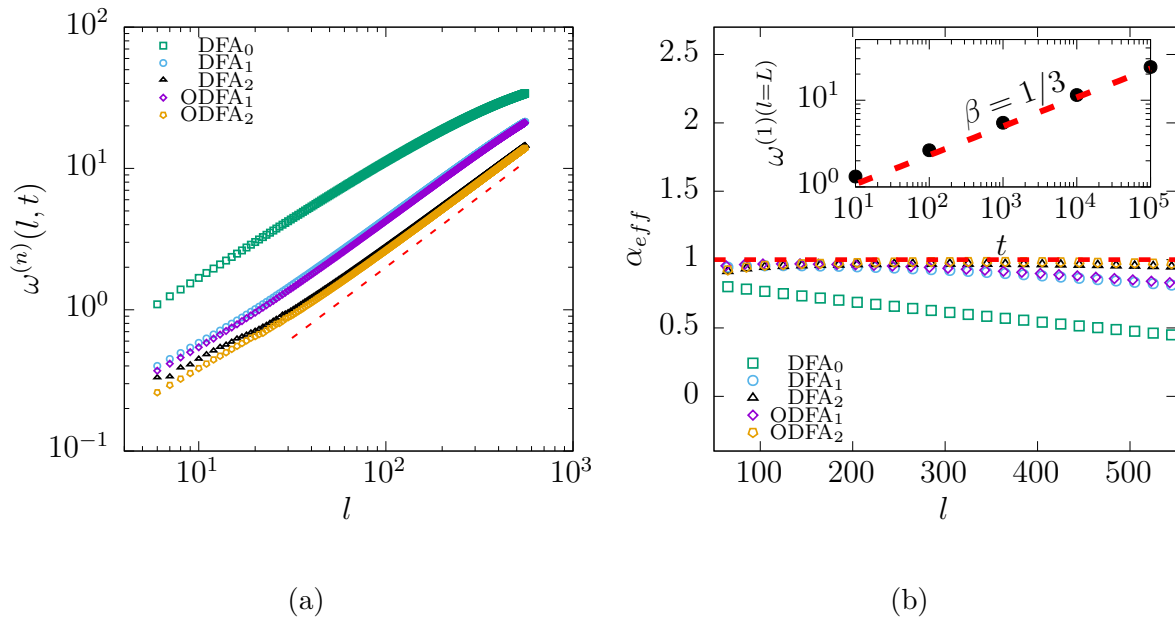


Fig 2.7: (a) Ilustração da evolução da rugosidade local, utilizando diferentes métodos, como função do tamanho lateral da janela para $t = 10^6$. (b) Expoente de rugosidade local efetivo, calculado usando a Eq. 2.25, onde a linha tracejada indica o valor esperado do expoente de rugosidade local para este modelo $\alpha_{V LDS}^{loc} = 1$. O “inset” mostra a evolução do expoente de crescimento usando ODFA₁.

2.6 Modelos Discretos da Classe VLDS

Apresentaremos modelos conservativos, que se dizem pertencer à classe VLDS, e suas regras de deposição para os modelos discretos, a saber: CRSOS [100], DT [101] e CV [61], onde as partículas depositadas sempre seguem a restrição denominada sólido sobre sólido (*solid on solid-SOS*). Como consequência, a restrição SOS não permite espaços vazios na coluna onde partículas são depositadas.

2.6.1 Modelo CRSOS

Este modelo de rede é conhecido na literatura como deposição sólido sobre sólido conservativo (*Conserved Growth in a Restricted Solid-on-Solid model-CRSOS*) [51, 52], que é similar ao modelo de deposição sólido sobre sólido restritivo (*Restrictec Solid on Solid-RSOS*) [102]. Parte desta diferença está no fato de que no modelo CRSOS as partículas são conservadas. O processo de deposição obedece às seguintes regras: uma coluna i é selecionada aleatoriamente no substrato/filme. Se a condição $\delta h \leq M$ é satisfeita, uma nova partícula é acrescentada ao topo da coluna i , onde δh é a diferença de altura entre a coluna i com seus vizinhos laterais e M é um parâmetro que controla a inclinação local, que toma valores de $0, 1, 2, \dots, n$. Se a condição não for obedecida, a partícula inicia uma caminhada aleatória sobre o substrato/filme, até encontrar um lugar que obedeça a condição RSOS. Para os resultados apresentados nesta tese, usaremos a condição $M = 1$ e denotaremos a este modelo com esta condição como CRSOS. Na Fig. 2.8a, ilustram-se as regras de deposição para este modelo.

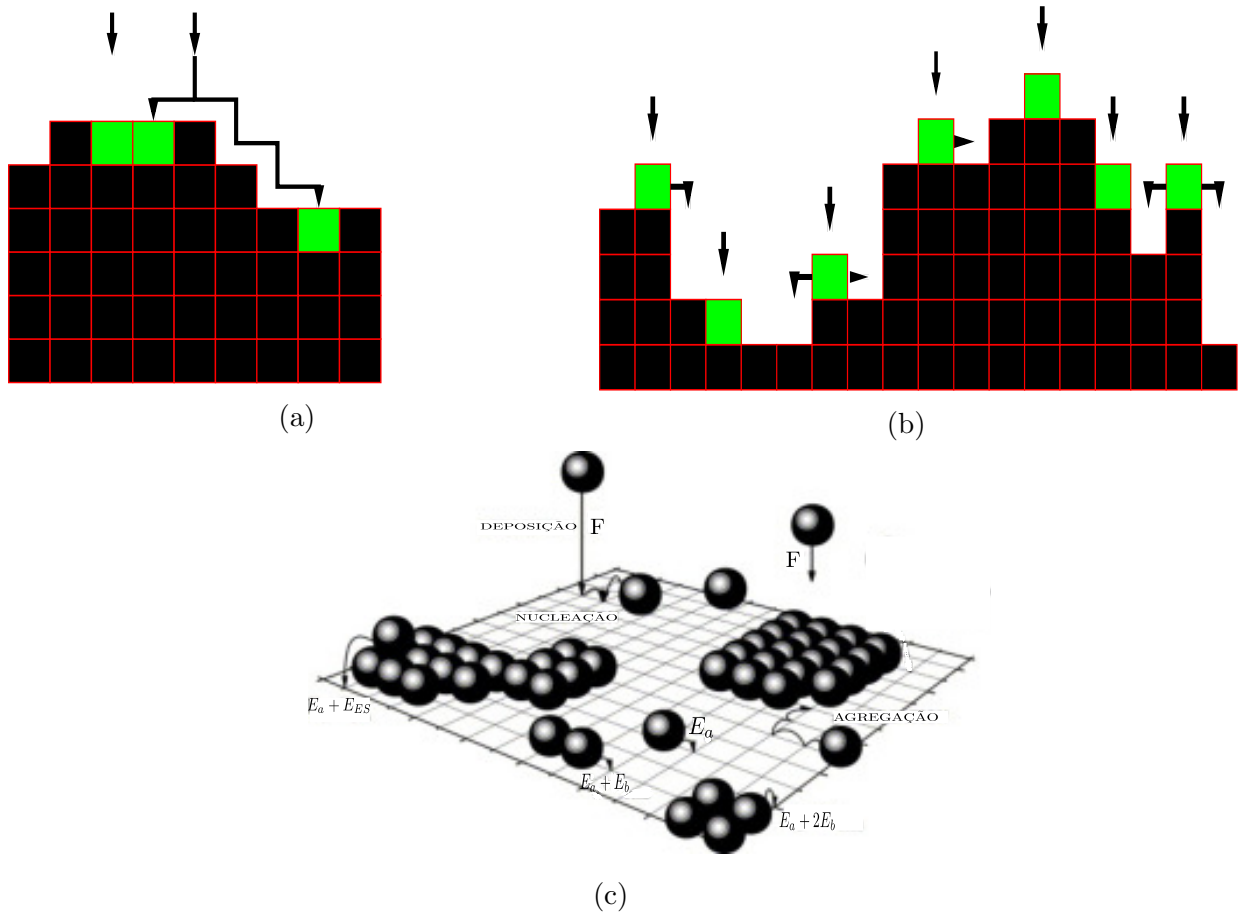


Fig 2.8: Regras de crescimento para diferentes modelos, em que as setas indicam a coluna escolhida aleatoriamente. A cor preta representa as partículas depositadas, e a verde as novas partículas. (a) CRSOS, (b) DT em 1 + 1 dimensões e (c) ilustração esquemática do modelo CV em 2 + 1 dimensões. (Figura c, retirada e modificada da referência [13])

2.6.2 Modelo DT

Este modelo é conhecido na literatura como *Das Sarma and Tamborenea* [50]. Para que uma partícula seja depositada sobre o substrato/filme, esta escolhe uma coluna i aleatoriamente e procura entre suas colunas laterais aumentar seu número de ligações, difundindo-se para a coluna com maior quantidade. Tal condição é obedecida quando a partícula não possui nenhuma ligação lateral. No caso em que a partícula não possui ligações laterais e não é possível aumentá-las, esta permanece fixa no topo da coluna i . A Fig. 2.8b mostra as regras deposição deste modelo em 1 + 1 dimensões.

Para este modelo, expoentes de rugosidade local próximos de $\alpha_{loc} \approx 0,7$ [66, 67] são reportados em 1+1 dimensões. Estes valores são distintos aos expoentes de rugosidade global, calculados por meio da teoria RG para equação VLDS, e utilizando correções de primeiro e segundo laço, respectivamente. Esta discrepância sugere a presença de escala anômala [43, 69]. Ademais, distribuições de rugosidade local [56] têm mostrado evidências que este modelo possui escala normal para 1+1 dimensões. O modelo DT segue sendo controverso. Portanto, devemos ter cuidado com seus expoentes de rugosidade local,

especialmente sem técnicas de redução de ruído [68, 103, 104]. Esta técnica consiste em adicionar um contador K ao sítio j , onde este será acrescentado em $K + 1$, mantendo um registro de quantas vezes a partícula atingiu esse sítio na superfície, até este alcançar um valor no parâmetro m (fator de ruído) para que a partícula possa ser depositada. Depois disto, o contador é reiniciado ($K = 0$) para o sítio j , voltando novamente a realizar o mesmo processo [105]. Esta técnica é útil para eliminar correções na escala e, desta maneira, determinar a classe de universalidade [103], como, por exemplo, o modelo DT [68].

Os modelos anteriormente descritos são considerados irreversíveis, haja vista que estes são bastante artificiais e não atendem à uma descrição completa da maioria dos resultados. Em seguida, descreveremos um modelo mais realista usado para compreender processos microscópicos de crescimento epitaxial, no qual uma partícula pode se desprender de uma posição inicial e migrar sobre o substrato/filme, pois a ação da energia térmica e sua mobilidade não está limitada. Além disso, podemos adicionar elementos físicos mais realistas.

2.6.3 Modelo CV

Um modelo que cumpre com estas exigências é o modelo *Clarke Vvedensky-CV* [44, 61, 62], onde uma coluna i é selecionada aleatoriamente e a partícula depositada se difunde sobre o substrato/filme com uma taxa de difusão $D = \nu_0 \exp(-E/k_B T)$. Seguindo a relação de **Arrhenius**, em que ν_0 é associado à frequência de salto dos átomos no substrato/filme, E está associada à energia de ativação que é própria do material a ser investigado, k_B é a constante de **Boltzmann** e T a temperatura do substrato/filme. Os átomos são adsorvidos em posições aleatórias no substrato/filme, com um intervalo de tempo dado por $\delta t = 1/FL^d$, sendo F o fluxo de átomos que são depositados sobre o substrato/filme e L^d o tamanho lateral do sistema. O crescimento do substrato/filme é assumido em equilíbrio termodinâmico é do tipo SOS. Os átomos do substrato/filme são tratados como osciladores harmônicos em duas dimensões, com energia média de $2k_B T$, e frequência característica dada por $\nu_0 = 2k_B T/h$, em que h é a constante de **Planck** [62]. A energia de ativação (E) inclui a contribuição de dois termos, de forma que $E = E_a + nE_b$, onde E_a é a energia de ligação dos átomos (adsorvidos) com o filme/substrato, E_b é a energia de ligação de um átomo com seus primeiros vizinhos laterais e n representa o número de vizinhos laterais. Portanto, a difusão das partículas no substrato/filme pode se expressar como o produto de dois termos $D = D_0 \epsilon^n$, nos quais $D_0 = \nu_0 \exp(-E_a/k_B T)$ e $\epsilon = \exp(-E_b/k_B T)$. Um parâmetro de importância deste modelo é a relação entre a taxa de difusão e a taxa de deposição definida por $R = D_0/F$, que representa o número de passos sobre o substrato/filme antes de que a próxima partícula seja absorvida [63]. Para ν_0 , usualmente é considerado tomar valores da ordem de $\sim 10^{12}$ em simulações e trabalhos analíticos [13]. Durante a deposição acontecem diferentes processos, sendo um destes a nucleação que ocorre pelo encontro de átomos que se difundem em um terraço, formando ilhas bidimensionais e estas, por sua vez, crescem pela agregação de novos átomos que se difundem no mesmo terraço. As barreiras nas bordas dos degraus usualmente são chamadas barreiras de Ehrlich-Schwobel (ES), as quais causam um desequilíbrio entre fluxo de partículas ascendente e descendente em superfícies com degraus, dando origem à formação de ilhas tridimensionais [106, 107]. Uma ilustração do modelo CV é mostrada na Fig. 2.8c, para

2 + 1 dimensões.

Investigações prévias sobre o modelo CV sugerem expoentes de escala que dependem da temperatura e escala anômala da rugosidade da superfície [42–44]. Recentemente, a rugosidade local no modelo CV em 2+1 dimensões tem sido analisada e um transiente de escala anômala foi encontrado para superfícies não auto-afins [63]. Simulações numéricas em 2+1 dimensões encontraram valores nos expoentes de crescimento e dinâmico de $\beta \approx 0,2$ e $z \approx 3,33$, respectivamente [63], os quais corroboram aos calculados com a teoria RG com correções de primeiro laço para a equação VLDS [31, 32].

Capítulo 3

RESULTADOS E DISCUSSÕES EM MODELOS DISCRETOS DE 1 + 1 E 2 + 1 DIMENSÕES

Neste capítulo, apresentam-se os resultados de uma investigação sobre os modelos de rede conhecidos na literatura, cujo objetivo é extrair o expoente de rugosidade local e comparar com aquele previsto por modelos contínuos descritos pela equação VLDS em $d = 1, 2$ dimensões. Para este propósito, usaremos os métodos DFA_n e $ODFA_n$, com $n = 0, 1, 2$, e discutiremos a escala anômala de rugosidade superficial. Iniciaremos apresentando resultados para uma condição inicial criada artificialmente com comprimento característico, sobre a qual é aplicado o modelo de etching com deposição, cujos reportes na literatura sugerem que este modelo é descrito pelo conjunto de expoentes de escala da classe KPZ. Mostraremos resultados utilizando os modelos CRSOS, CV e DT, este último considerando uma situação em que a técnica de redução de ruído é aplicada para 1+1 dimensões. Finalmente, usaremos o modelo CV em 2+1 dimensões para discutir o expoente de rugosidade local.

3.1 Resultados em 1+1 Dimensões

3.1.1 Validação do Método $ODFA_n$

Para validar o método ODFA, quando comparado com DFA, utilizamos primeiramente a função Weierstrass [108] definida como:

$$f(x) = 3 \sum_{n=0}^{\infty} A^{-2n} \sin(BA^n x + \phi(n)) + C \cos(Dx), \quad (3.1)$$

cujos parâmetros usados nesta simulação foram $A = 1.359$, $B = 3.386$, $\phi(n) = 2\pi \text{Ran} - \pi$, $C = 0.009$ e $D = 0.003$, onde Ran é um número pseudoaleatório no intervalo $(0,1]$, os quais permitem criar um perfil com forma de morros. Sobre esta condição inicial, aplica-se o modelo de etching [109] (ver apêndice B) com deposição. O tamanho lateral do sistema considerado é $L = 13518$ e simulou-se a deposição até 3×10^3 camadas. O uso do modelo etching é justificado pois o mesmo leva a interfaces com alta rugosidade, apesar de

apresentar correções de escala [110, 111]. A Fig. 3.1a mostra o perfil com comprimento característico (presença de morros) em $t = 0$ e $t = 3 \times 10^3$ nos painéis inferior e superior, respectivamente. Para estimar o comprimento característico médio dos morros, usa-se a função de auto correlação altura-altura normalizada, antes e depois de aplicar o modelo de etching, e encontrou-se $\xi_0 \simeq 2000$. Desta maneira, corrobora-se que a estrutura de morros é conservada, como anteriormente dito, podendo ser verificado na Fig. 3.1b. Na Fig. 3.1c, apresenta-se a rugosidade local $\omega^{(n)}$, em função do tamanho lateral da janela l , em que uma comparação é realizada entre os métodos DFA_0 , DFA_n e ODFA_n , onde $n = 1, 2$. Observa-se que o expoente α_{loc} extraído com DFA_0 exibe um valor alto que é típico de superfícies que apresentam comprimento característico [112], isto é, devido ao domínio de grandes comprimentos de onda na escala, o qual não permite capturar as flutuações locais. Usando os métodos DFA_1 e DFA_2 , um expoente $\alpha_{loc} \sim 0,7$ é extraído. Foi observado que o método DFA_2 exibe um maior platô quando comparado ao DFA_1 (ver Fig. 3.1d). No entanto, o valor do expoente α_{loc} extraído com os métodos anteriormente mencionados, não é equivalente ao valor encontrado para o expoente de escala α da classe de universalidade KPZ. Resultados prévios sugerem que este modelo está enquadrado nesta classe de universalidade. Contudo, os métodos ODFA_1 e ODFA_2 conseguem extrair um valor do expoente $\alpha_{loc} \sim 0,5$ que confirma o expoente α esperado para a classe KPZ ($\alpha_{\text{KPZ}} = 1/2$ [29]). Além disso, um maior platô é analisado com ODFA_2 , em escalas menores ao comprimento médio dos morros. Estas medidas são confirmadas mediante o expoente da rugosidade local efetivo. A grandeza de $\alpha_{loc} > 0,5$, reflete aspectos geométricos do perfil/superfície que apresenta comprimento característico, como pode ser visto na Fig. 3.1d. A anterior, evidencia que ODFA_n pode ser usado para extrair o expoente α_{loc} em modelos de outra classe de universalidade.

Em seguida, apresentaremos um estudo detalhado de flutuações locais de superfície, em modelos discretos de rede que se dizem pertencer à classe VLDS (ver apêndice A), quais sejam: CRSOS, CV e DT em 1+1 dimensões. As simulações são iniciadas com um substrato plano ($h = 0$), considerando-se um tamanho lateral $L = 2^{14}$ que tem condições de contorno periódicas. As partículas são depositadas no substrato com fluxo normal $F = 1$, cumprindo a condição SOS [50]. Os resultados que se apresentarão possuem 1000 realizações independentes.

3.1.2 DFA_n e ODFA_n no Modelo CRSOS

Na Fig. 3.2, apresenta-se diferentes medidas para o modelo CRSOS. O perfil foi produzido via simulação computacional (Fig. 3.2a) em $t = 10^6$; e a função de auto-correlação altura-altura normalizada como função r para diferentes valores de t (Fig. 3.2b), rugosidade local $\omega^{(n)}$ (Fig. 3.2c) e o expoente efetivo de rugosidade local (Fig. 3.2d) em função do tamanho lateral da janela l para $t = 10^6$. Um perfil auto-afim com forma de morros (comprimento característico), menos evidentes, são observados (Fig. 3.2a). A presença destas estruturas são corroboradas utilizando a função de auto-correlação altura-altura normalizada (Fig. 3.2b). Uma estimativa do tamanho médio destes morros são obtidas mediante os primeiros zeros (ξ_0) da função $\Gamma(r, t)/\Gamma(0, t)$. No “inset” da Fig. 3.2b, pode ser visto o cálculo de ξ_0 para diferentes valores de t . Um valor $\xi_0 \approx 433$ é medido para $t = 10^6$. Além disso, ξ_0 como função de t , é esperado escalar como a Eq. 2.8, em que o valor previsto para o

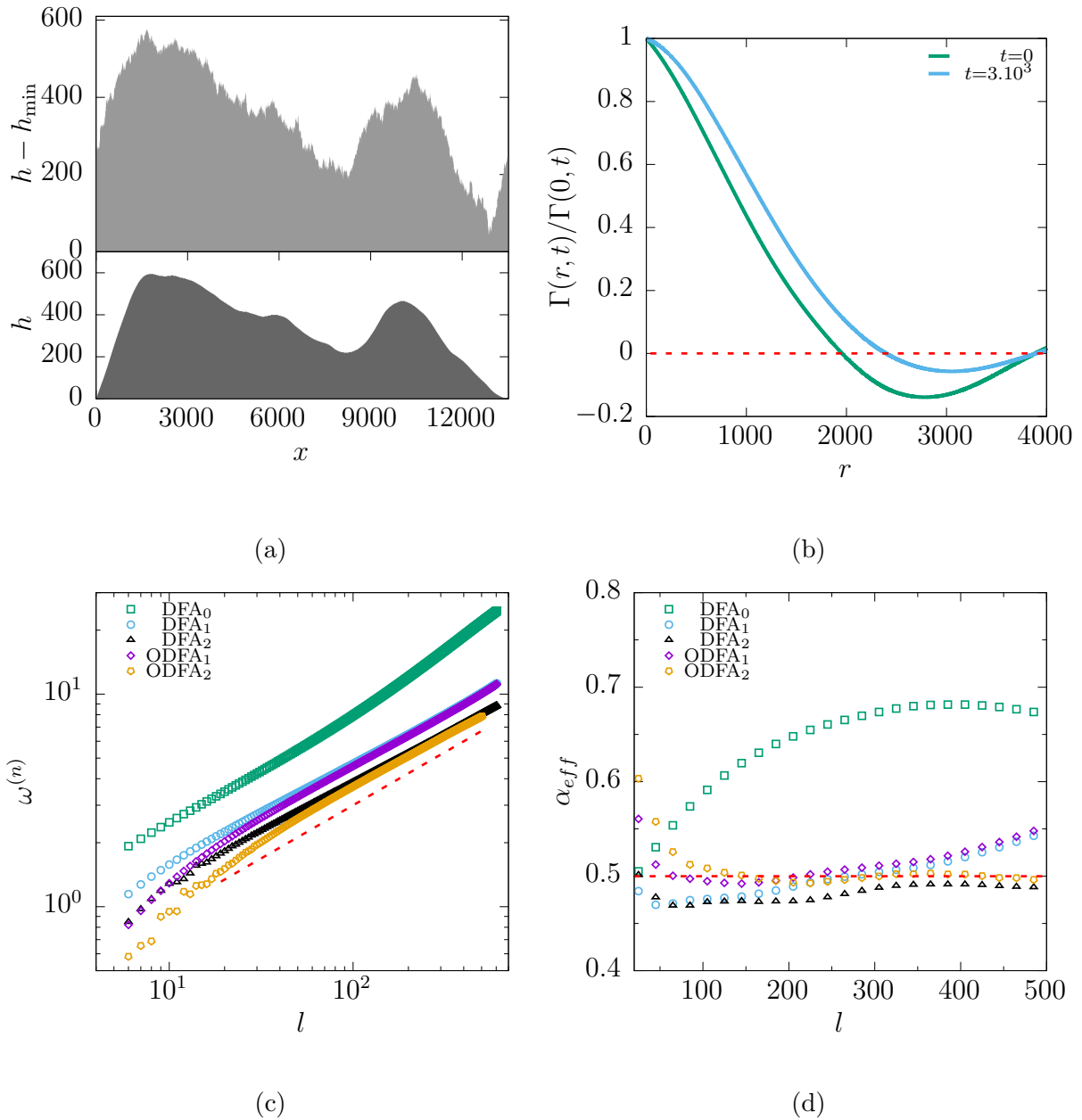


Fig 3.1: (a) Condição inicial gerada usando a função Weierstrass $t = 0$ (painel inferior) e seu perfil após de $t = 3 \times 10^3$ (painel superior), usando o modelo de Etching. (b) Ilustração da função de auto-correlação altura-altura. (c) Rugosidade local e (d) Expoentes efetivos utilizando os diferentes métodos.

expoente $1/z_c$ deve ser próximo de $1/z$ (linha tracejada verde), considerando os cálculos da teoria RG de primeiro e segundo laço para a classe de universalidade VLDS [31, 32], de modo a confirmar os resultados prévios para este modelo [53]. O cálculo das flutuações locais utilizando DFA_0 (Fig. 3.2c), exibe uma inclinação local da ordem de 0,7, para escalas no intervalo $l \lesssim 10^2$ (Fig. 3.2d), ratificando os resultados reportados na literatura de investigações prévias em modelos da classe VLDS [66, 67]. No entanto, a teoria RG de primeiro laço prediz que $\alpha = 1$ para esta classe de universalidade [113]. Os métodos DFA_1 e $ODFA_1$, fornecem resultados similares, quando comparados com DFA_2 e $ODFA_2$,

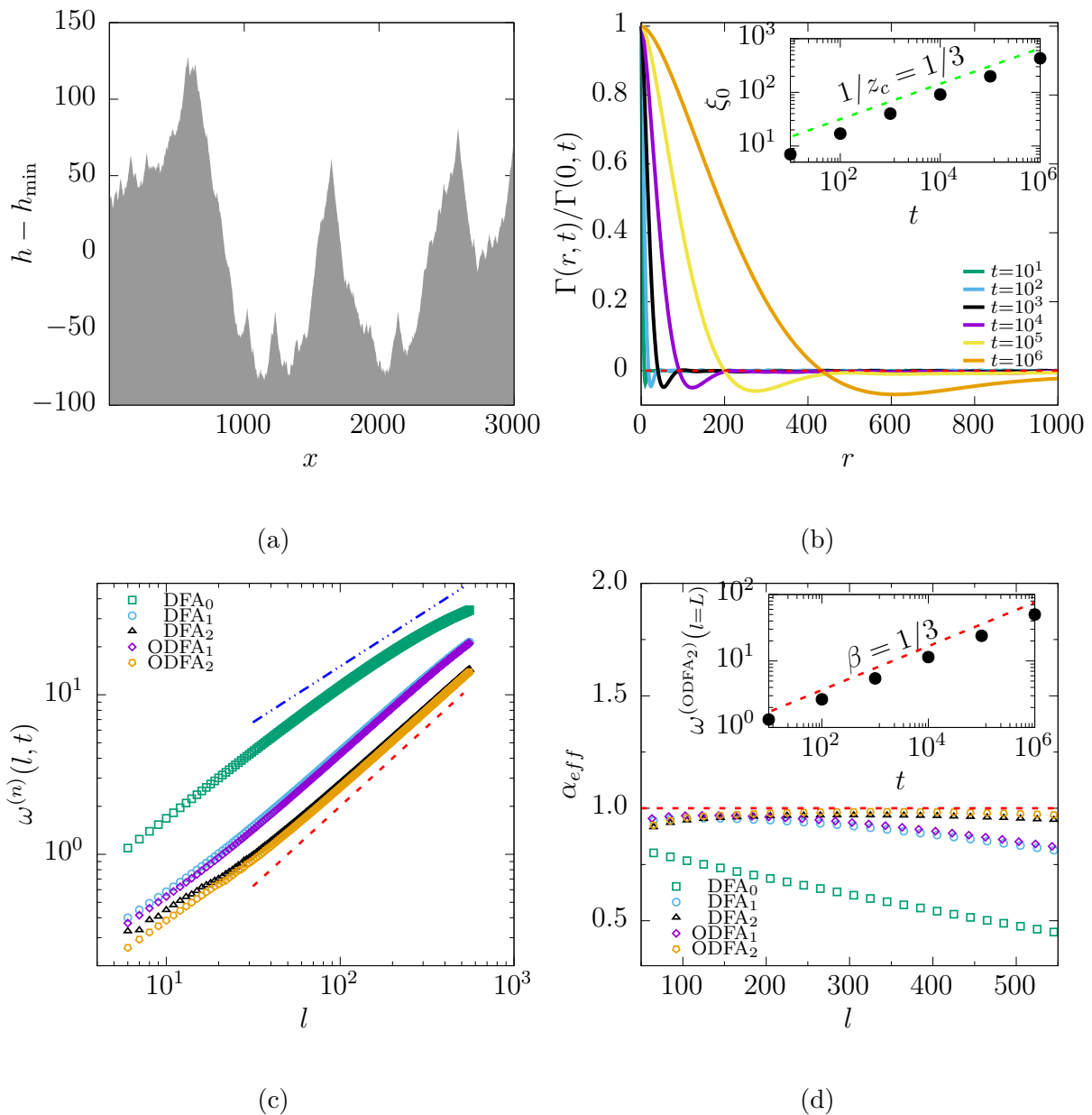


Fig 3.2: Modelo CRSOS: (a) Perfil para $t = 10^6$. (b) Função de auto-correlação altura-altura normalizada como função de r para diferentes valores de t . (c) Rugosidade local como função do tamanho lateral da janela l (linhas tracejadas azul 0,7 e vermelha 1) e (d) expoente efetivo da rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^6$. Os “insets” de (b) e (d) ilustram a evolução dos zeros da função de correlação versus t e evolução $\omega^{(ODFA_2)}(l = L)$ versus t .

reafirmados pelas análises dos expoentes de rugosidade local, os quais podem ser vistos nas Figs 3.2c e 3.2d. Isto é, pode-se justificar pela geometria auto-afim (fractal), exibida pelo perfil, como pode-se observar na Fig. 3.2a, que resulta em diferenças insignificantes entre as flutuações de altura determinadas pela Eq. 2.12 e Eq. 2.14, ou seja, $\delta_{DFA}^{(2)} \approx \delta_{ODFA}^{(2)}$. Diferenças entre $\delta_{DFA}^{(2)}$ e $\delta_{ODFA}^{(2)}$, para este modelo são mostradas na Fig. 3.3. Verificamos que a escala sujeita ao ajuste polinomial de segunda ordem, proporciona platôs maiores

quando comparada às de primeira ordem. Expoentes de rugosidade local são extraídos usando um ajuste polinomial de primeira ordem em um platô, $105 \lesssim l \lesssim 205$, obtendo a gradeza de $\alpha_{loc}^{DFA_1} = 0,953(2)$ e $\alpha_{loc}^{ODFA_1} = 0,966(1)$. Para a segunda ordem em um platô de $260 \lesssim l \lesssim 460$, encontrou-se que $\alpha_{loc}^{DFA_2} = 0,966(2)$ e $\alpha_{loc}^{ODFA_2} = 0,983(1)$, respectivamente, como pode ser verificado na Fig 3.2d, sendo o expoente extraído com ODFA₂, consistente com os reportados, usando correções de primeiro laço da teoria RG, onde $\alpha_{loc} = \epsilon - 1$ [113]. Este resultado sugere que as correções no expoente de primeiro laço da teoria RG são consistentes com os reportados em cálculos de segundo laço de RG [113], melhorando, desta maneira, os resultados previamente reportados na Ref. [53] para baixas dimensões. Evidenciamos que o resultado obtido para α_{loc} com o método ODFA₂ no modelo CRSOS, onde se esperam correções fracas ao escalonamento, é ligeiramente superior em um 4% de desvio ao expoente de rugosidade global reportado na Ref. [53], corroborando, assim, a não existência de escala anômala assintótica neste modelo.

O “inset” da Fig 3.2d, mostra a evolução de $\omega^{(n)}$ como função de t , avaliada em $l = L$, sabendo que L é o tamanho lateral considerado nestas simulações, usando ODFA₂, em que se espera que escale segundo a Eq. 2.2.

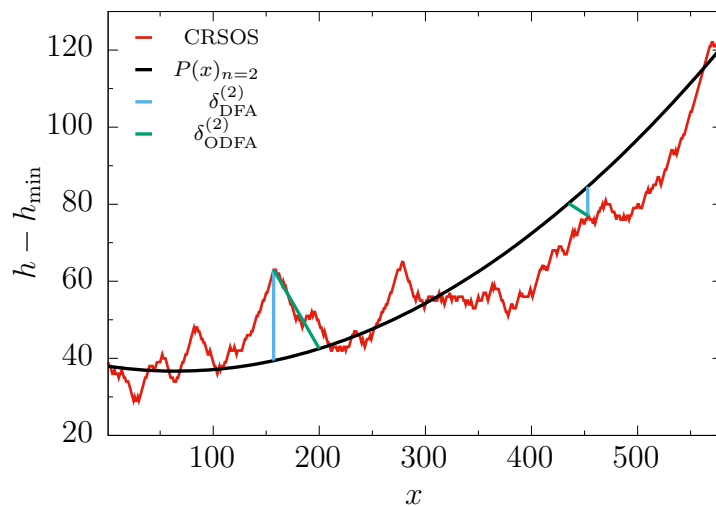


Fig 3.3: Segmento de perfil do modelo CRSOS, sobre o qual é realizado um ajuste polinomial de segunda ordem ($P(x)_{n=2}$), através de mínimos quadrados, em que se ilustra a distância δ^2 calculada com os métodos DFA₂ e ODFA₂, respectivamente.

3.1.3 DFA_n e ODFA_n no Modelo CV

A Fig. 3.4a, mostra o perfil gerado pelo modelo CV em $t = 10^6$, onde estruturas com forma de morros são observadas com vales mais profundos quando comparados aos gerados pelo modelo CRSOS, que são corroboradas pelo comportamento da função $\Gamma(r, t)/\Gamma(0, t)$, como é observado na Fig.3.4b. Uma avaliação do comprimento médio destas estruturas é determinada utilizando os valores dos primeiros zeros (ξ_0) da função $\Gamma(r, t)/\Gamma(0, t)$ e ξ_0 é esperado escalar seguindo a Eq. 2.8, como se mostra no “inset” da Fig. 3.4b, onde um valor $\xi_0 \approx 74$ é estimado para $t = 10^6$. Neste modelo, as diferenças dos expoentes extraídos com os métodos DFA_n e ODFA_n, são mais relevantes, como pode ser visto nas

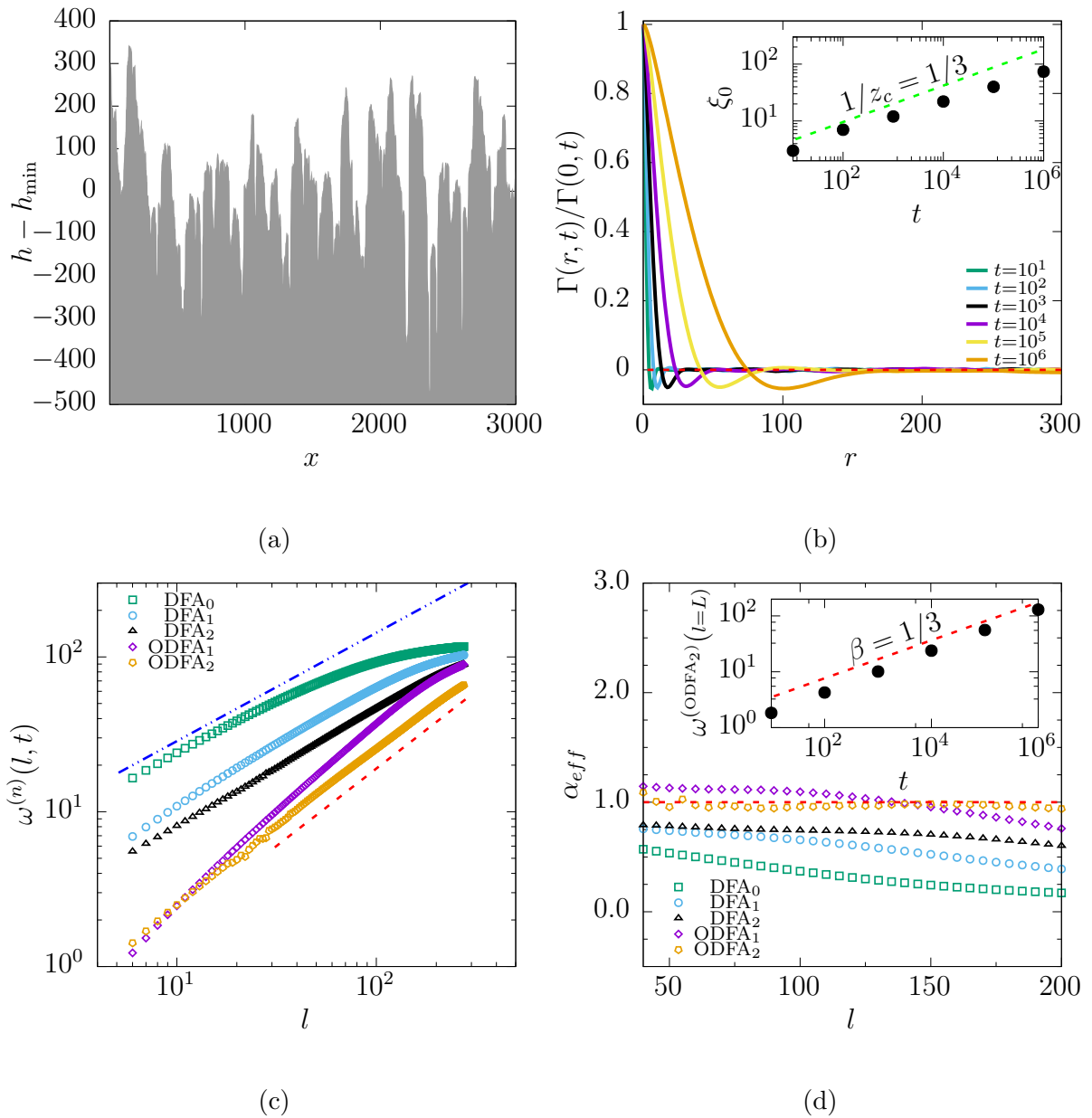


Fig 3.4: Modelo CV: (a) Perfil para $t = 10^6$. (b) Função de auto-correlação altura-altura como função de r para diferentes t . (c) Rugosidade local como função do tamanho lateral da janela l (linhas tracejadas azul 0,7 e vermelha 1) e (d) Expoente efetivo de rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^6$. Os “insets” (b) e (c) ilustram: evolução dos zeros da função de correlação versus t e $\omega^{(ODFA_2)}(l = L)$ versus t .

Figs. 3.4c e 3.4d. O método DFA₀ fornece um expoente $\alpha_{loc}^{DFA_0} \approx 0,7$ em escalas pequenas, sendo este resultado igualmente obtido para o modelo CRSOS. Além disso, platôs maiores são obtidos por meio dos métodos DFA₂ e ODFA₂ para o intervalo $50 \lesssim l \lesssim 170$, com valores de $\alpha_{loc}^{DFA_2} \approx 0,73(3)$ e $\alpha_{loc}^{ODFA_2} \approx 0,96(1)$, quando comparados com DFA₁ e ODFA₁ respectivamente, no intervalo $50 \lesssim l \lesssim 150$, com expoentes $\alpha_{loc}^{DFA_1} \approx 0,65(6)$ e $\alpha_{loc}^{ODFA_1} \approx 1,14(4)$; podendo ser verificado na Fig. 3.4d. Entretanto, com o método ODFA₁ um expoente efetivo de rugosidade $\alpha_{loc} \approx 1,14(4)$, percebe-se que este valor é superior a 1

e pode ser justificado como uma consequência de altas inclinações locais em regiões do perfil, onde este se torna aproximadamente colunar, como é visto na Fig. 3.4a. Aqui, o ajuste linear não consegue adaptar-se bem a estas estruturas, embora seja possível com o ajuste quadrático. O expoente extraído com o método ODFA₂, confirma a presença de escala normal que foi reportada para o modelo CV em 2+1 dimensões nas Refs. [63, 99]. O “inset” na Fig. 3.4d, apresenta a evolução de $\omega^{(n)}$ como função de t , avaliada em $l = L$, com o método ODFA₂, em que é esperado escalar como a Eq. 2.2.

3.1.4 DFA_n e ODFA_n no Modelo DT

Sem Redução de Ruído

A Fig 3.5, ilustra resultados de simulações computacionais do modelo DT. Na Fig. 3.5a, apresenta-se o perfil deste modelo após o depósito 10⁸ monocamadas, em que se observa estruturas de morros mais evidentes quando comparadas com as obtidas usando os modelos CRSOS e CV. A presença destas estruturas é confirmada pelo comportamento da função $\Gamma(r, t)/\Gamma(0, t)$. Uma estimativa do comprimento médio deste morros se faz, da mesma maneira que na seção anterior, sem aplicar a técnica de redução de ruído é $\xi_0 \approx 299$ para $t = 10^8$. O “inset” da Fig 3.5b mostra como evolui ξ_0 versus t , sendo também esperado que ξ_0 obedeça à Eq. 2.8, como aconteceu para os modelos CRSOS e CV. Nas Figs 3.5c e 3.5d, apresenta-se a rugosidade local com os diferentes métodos nos quais, novamente, diferenças notáveis são observadas entre os métodos ODFA_n e DFA_n. O método DFA₀ consegue extrair um valor do expoente de rugosidade local próximo de 0,7, onde este resultado é similar aos obtidos para os modelos CRSOS e CV. Para DFA₁ e ODFA₁, observam-se platôs de α_{loc} no intervalo $50 \lesssim l \lesssim 400$, com valores de $\alpha_{loc}^{\text{DFA}_1} = 0,744(2)$ e $\alpha_{loc}^{\text{ODFA}_1} = 1,116(7)$, onde um platô maior que 1 é visto com o método ODFA₁ e pode ser justificada da mesma maneira que no modelo CV, a saber: uma consequência de altas inclinações locais em lugares onde o perfil é aproximadamente colunar. Na Fig. 3.6, podem ser vistas as diferenças que existem entre as distâncias calculadas utilizando os métodos DFA₂ e ODFA₂, levando-nos a concluir que as diferenças podem ser enormes de um ponto no perfil até o polinômio de ajuste, segundo o método utilizado. No entanto, um platô é visto no intervalo $67 \lesssim l \lesssim 262$ com o método DFA₂, cujo valor do expoente $\alpha_{loc}^{\text{DFA}_2} = 0,772(6)$, como podemos verificar na Fig. 3.5d. Para o expoente α_{loc} extraído com o método ODFA₂, é observado um cruzamento entre dois regimes de escala. Para pequenas escalas dentro do comprimento lateral médio dos morros, um platô é visto no intervalo $67 \lesssim l \lesssim 262$, onde uma estimativa do valor de $\alpha_{loc}^{\text{ODFA}_2} = 0,903(1)$, sendo esta medida consistente de acordo com os resultados reportados usando a aplicação da técnica de redução de ruído para um parâmetro de ruído $m \geq 64$ [68]. Além disso, em escalas longas para o intervalo de $582 \lesssim l \lesssim 730$, um valor de $\alpha_{loc}^{\text{ODFA}_2} = 0,976(1)$ é determinado como observa-se na Fig. 3.5d. No entanto, o método ODFA₂, no modelo DT, fornece a primeira evidência sem aplicação da técnica de redução de ruído para o expoente de rugosidade local [68, 103, 104] consistente com aqueles previstos pela teoria RG de primeiro e segundo laço para a classe VLDS. O “inset” da Fig. 3.5d apresenta a evolução de $\omega^{(n)}$ como função de t , com o método ODFA₂, onde é esperado escalar com lei de potência da Eq. 2.2.

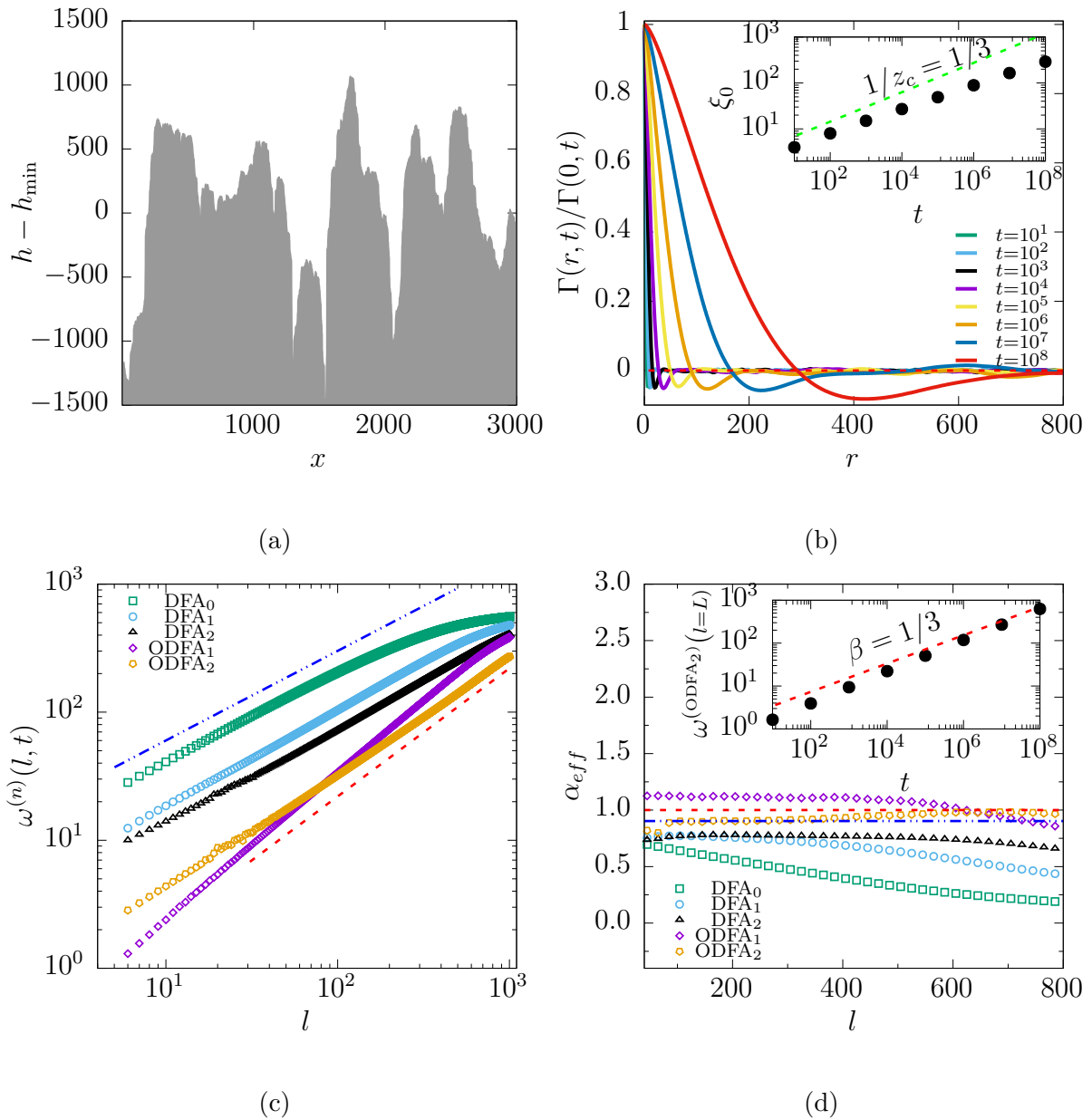


Fig 3.5: Modelo DT: (a) Perfil para $t = 10^8$. (b) Função de auto correlação altura-altura como função de r para diferentes t . (c) Rugosidade local como função do tamanho lateral da janela l (linhas tracejadas azul 0.7 e vermelha 1) e (d) Expoente efetivo de rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^8$. Os “insets” (b) e (c) ilustram: evolução dos zeros da função de correlação versus t e $\omega^{(ODEFA_2)}(l = L)$ versus t .

Com Redução de Ruído

Na Fig. 3.7, apresentam-se os resultados para o modelo DT aplicando a técnica de redução de ruído, cujo parâmetro de ruído utilizado nesta simulação é $m = 4$. A descrição desta técnica é discutida na seção 2.6.2. A Fig. 3.7a ilustra o perfil para $t = 10^8$, onde este possui estruturas com forma de morros, que são comprovadas pelo comportamento da função $\Gamma(r, t)/\Gamma(0, t)$. A estimativa do tamanho lateral médio destes morros é determinado pelos

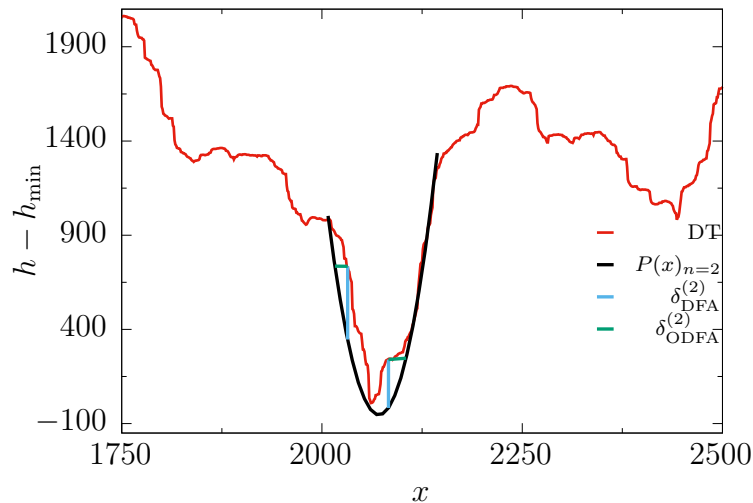


Fig 3.6: Segmento de perfil para o modelo DT, no qual foi realizado um ajuste polinomial de segunda ordem ($P(x)_{n=2}$) através do método de mínimos quadrados, onde se ilustra a distância δ^2 com os métodos DFA_2 e ODFA_2 , respectivamente.

zeros da função $\Gamma(r, t)/\Gamma(0, t)$, a qual, resultando do mesmo modo que nas seções anteriores, espera-se obedecer a lei de escala de Eq. 2.8. Uma estimativa do comprimento lateral médio dos morros é da ordem de $\xi_0 \approx 564$ em $t = 10^8$. Ademais, observa-se uma diminuição da rugosidade global à medida que aumenta o valor do parâmetro de ruído (m), tendo como consequência um aumento do tamanho lateral médio dos morros e uma diminuição dos vales no perfil. O aumento do comprimento lateral médio dos morros é confirmado pelos zeros da função de auto correlação altura-altura como é visto no “inset” da Fig. 3.7b. O uso da técnica de redução de ruído não deve modificar a classe de universalidade [126]. No entanto, altos valores do parâmetro m , leva como consequência uma redução significativa da rugosidade na interface. Porém, esta se torna mais suave, facilitando extrair o expoente da rugosidade local próximo de 1. Nos resultados apresentados com a técnica de redução, usou-se um valor do parâmetro $m = 4$, sendo este baixo. Além disso, observa-se que a rugosidade da interface é reduzida quando comparada com a gerada com o modelo original, mas prossegue suficientemente alta, como pode ser visto na Fig. 3.8. A rugosidade local para os diferentes métodos é ilustrada na Fig. 3.7c, e seu expoente efetivo na 3.7d. Expoentes da rugosidade local extraídos com os métodos ODFA_2 e DFA_2 são $\alpha_{loc}^{\text{ODFA}_2} = 0,967(2)$ e $\alpha_{loc}^{\text{DFA}_2} = 0,804(7)$, respectivamente, no intervalo $495 \lesssim l \lesssim 890$. Os métodos que usam um ajuste polinomial de primeira ordem ODFA_1 e DFA_1 , fornecem expoentes $\alpha_{loc}^{\text{DT}} = 1,115(7)$ e $\alpha_{loc}^{\text{DT}} = 0,799(7)$, para o intervalo $150 \lesssim l \lesssim 400$. O expoente da rugosidade local conseguido com o método ODFA_2 , é próximo ao valor calculado usando a teoria RG de primeiro e segundo laço para classe de universalidade VLDS. No entanto, o expoente de rugosidade local extraído com o método DFA_2 , leva a resultados reportados na Ref. [68], onde se utilizou um valor no parâmetro m similar para a técnica de redução de ruído. Um valor do expoente de rugosidade global próximo de 1,2, também foi relatado na Ref. [68], para essa mesma faixa do parâmetro m . Este resultado pode levar a uma interpretação errônea da escala anômala para o modelo DT, em virtude que esta é sustentada em valores do expoente da rugosidade global

maiores que 1 ($\alpha > 1$). Nossos resultados com o método ODFA₂, sugerem ausência de escala anômala para no modelo DT. O “inset” da Fig. 3.7d mostra a rugosidade global em função de t , calculada com ODFA₂, e avaliada em $l = L$.

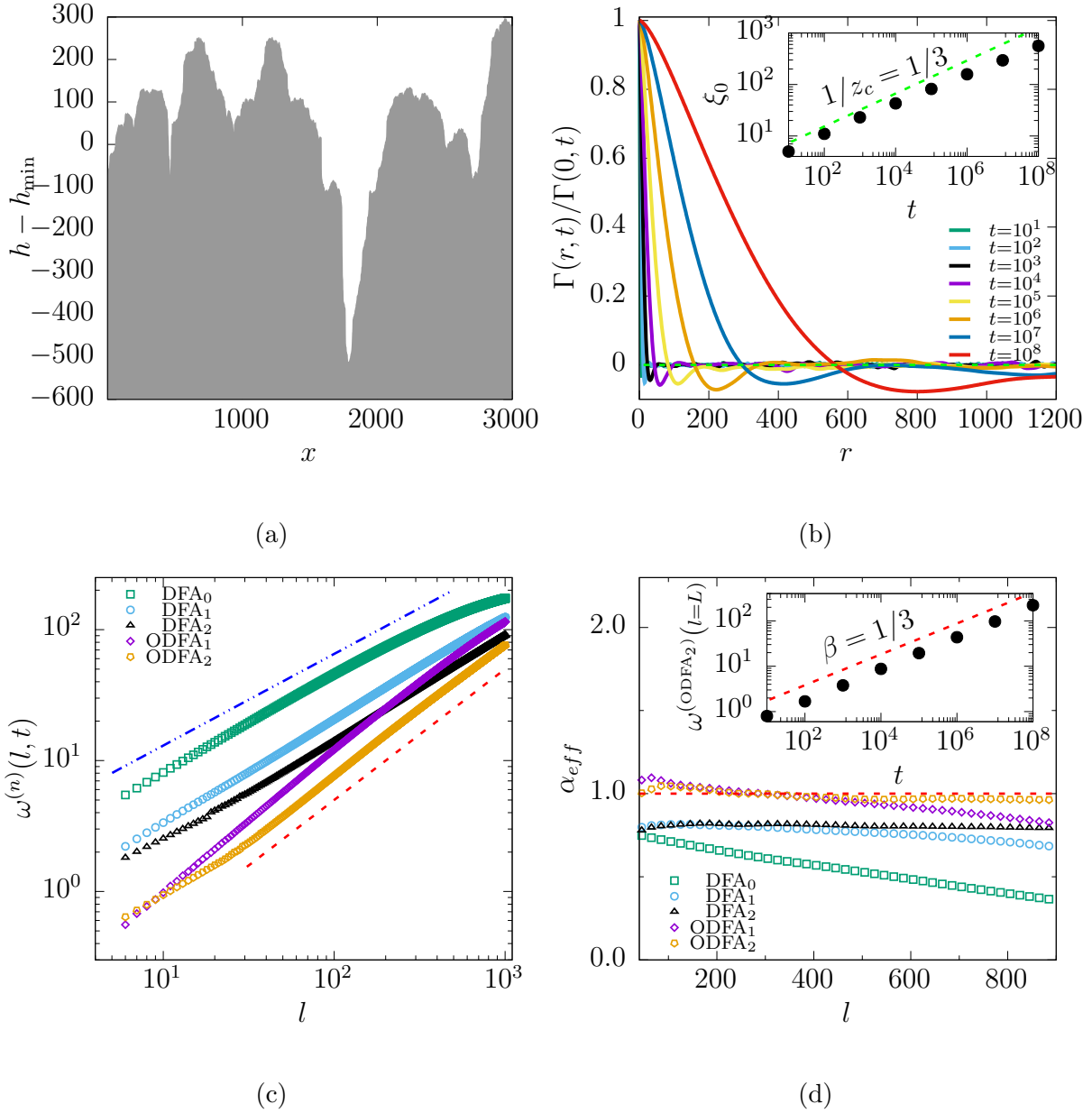


Fig 3.7: Modelo DT com redução de ruído $m = 4$: (a) Perfil para $t = 10^8$. (b) Função de correlação altura-altura como função de r para diferentes t . (c) Rugosidade local como função do tamanho lateral da janela l (linhas tracejadas azul 0,7 e vermelha 1) e (d) Expoente efetivo de rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^8$. As subfiguras (b) e (c) ilustram: evolução dos zeros da função de correlação versus t . Evolução $\omega^{(ODFA_2)}(l = L)$ versus t .

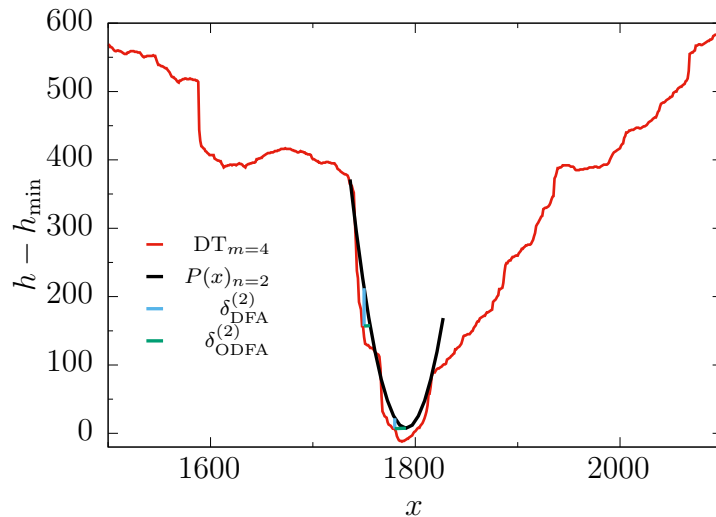


Fig 3.8: Segmento de perfil para o modelo DT, onde foi aplicada a técnica de redução de ruído para $m = 4$, sobre o qual é realizado um ajuste polinomial da segunda ordem ($P(x)_{n=2}$) através do método de mínimos quadrados, em que se ilustra a distância δ^2 com DFA_2 e $ODFA_2$, respectivamente.

3.1.5 Considerações para 1+1 Dimensões

Na tabela 3.1, são apresentados os resultados dos expoentes da rugosidade local, obtidos através dos métodos DFA_n e $ODFA_n$ para $n = 1, 2$, por meio de simulações computacionais em modelos de rede 1 + 1 dimensões que se acreditam pertencer à classe VLDS. Apresentamos resultados da investigação em três modelos: CRSOS [51, 52], CV [61, 62] e DT [50]. Os resultados numéricos foram encontrados mediante análises do expoente da rugosidade local [35, 70] das interfaces, geradas mediante simulação computacional dos modelos CRSOS, CV e DT, através do método $ODFA_n$ (ver seção 2.5). A partir deste, é possível avaliar o expoente α_{loc} . Para tanto, recomenda-se aplicar este método em superfícies que possuam comprimento característicos (estrutura de morros). Por meio deste, é possível determinar a classe de universalidade. Para os modelos investigados, encontramos o expoente da rugosidade local no intervalo [0.96, 0.98], cujos resultados são compatíveis com os calculados usando correções de segundo laço da teoria RG, onde $\alpha = 1 - \epsilon$, com $\epsilon = 0,0306$ em 1+1 dimensões. Estes resultados descartam a existência da rugosidade anômala assintótica, assim como apresentados na Ref. [60]. Tais resultados são consistentes com a teoria RG, na qual empregam-se as correções de segundo laço [113], não obstante as correções de primeiro laço sejam calculadas em todas as dimensões, por meio da equação $\alpha_{loc}^{CV} = 1 - \epsilon$. Para o modelo DT, reportamos na literatura a primeira evidência da medida do expoente de rugosidade local confirmando que este pertence à classe VLDS. Para o modelo DT original, o valor do expoente α_{loc} para escalas pequenas é $\alpha_{loc}^{DT} = 0,903(1)$, que se encontra próximo ao expoente calculado para a classe VLDS ($\alpha_{loc}^{VLDS} = 1 - \epsilon$), de modo que não é exato. O que o difere do valor intermédio que é compatível com a classe VLDS (ver tabela 3.1 $DT_{(2)}$). Quando a técnica de redução de ruído é suficientemente fraca, eliminam-se, na escala, correções muito fortes. Entretanto, o expoente de rugosidade local extraído concorda com o expoente da classe VLDS. Nossos resultados são respaldados por análises teóricas de Haselwandter e Vvedensky [132–134],

que explicam a escala anômala aparente, baseados em análises multiescala de processos atomísticos de superfície. Finalmente, esta investigação apresentou como resultado uma publicação no jornal *Phys. Rev E* **99**, 022801 (2019). Em seguida, apresentaremos um estudo para o modelo CV em 2+1 dimensões, onde os métodos DFA_n e ODFA_n são usados.

Modelo	l	DFA_1	ODFA_1	l	DFA_2	ODFA_2
CRSOS	[105,205]	0,953(2)	0,966(1)	[260,460]	0,966(2)	0,983(1)
CV	[45,150]	0,65(6)	1.14(4)	[50,170]	0,73(3)	0,96(1)
$\text{DT}_{(1)}$	[50,400]	0,744(2)	1.116(7)	[67,262]	0,772(6)	0,903(3)
$\text{DT}_{(2)}$	-	-	-	[582,730]	-	0,976(1)
$\text{DT}_{m=4}$	[150,400]	0,799(7)	0,115(1)	[495,890]	0,804(7)	0,967(2)

Tabela 3.1: Comparação de valores do expoente de rugosidade local para os diferentes métodos, em que não se inclui resultados para o método DFA_0 .

3.2 Resultados em 2+1 Dimensões

3.2.1 DFA_n e ODFA_n no Modelo CV

As simulações com o modelo CV são realizadas em uma rede cúbica simples, usando um tamanho lateral $L = 1024$, com condições periódicas de contorno ao longo do substrato, em que os átomos são depositados com um fluxo normal $F = 1$, sobre o substrato que está liso em $h = 0$. Os parâmetros usados nas simulações são valores de $R = 10$ e $\epsilon = 0,01$, que correspondem a regimes, onde a temperatura é baixa e, desta maneira, obtém-se superfícies com alta rugosidade, que permitem uma análise mais precisa na escala, devido a que, em altas temperaturas, o crescimento é dominado por “*layer-by-layer*” [13, 127] durante um transiente demasiado longo.

A Fig. 3.9a mostra a morfologia típica gerada pelo modelo CV, após o depósito de 10^6 monocamadas, a qual apresenta uma superfície com forma de morros. A presença destes morros é verificada através do comportamento da função de auto correlação altura-altura normalizada. Uma estimativa do comprimento lateral médio destes morros é encontrada usando os valores mínimos (ξ_m) da função $\Gamma(r, t)/\Gamma(0, t)$, onde é esperado que o valor destes mínimos escale segundo a lei de potência descrita na Eq. 2.8, como pode ser visto no “inset” da Fig. 3.9b, onde um transiente é estimado para valores de $t \gtrsim 10^3$, cujo expoente é $1/z = 3/10$, sendo este típico da classe VLDS.

A Fig. 3.9c mostra a rugosidade local $\omega^{(n)}$ em função do tamanho lateral da janela l , utilizando os métodos DFA_n e ODFA_n , onde $n = 0, 1, 2$ para diferentes valores de t , em que a linha tracejada em vermelho indica o valor da inclinação prevista para este modelo, correspondendo a $2/3$. Na Fig. 3.9d, ilustra-se o expoente efetivo em função de l para $t = 10^6$, em que DFA_0 forma um pequeno platô em escalas pequenas no intervalo $6 \lesssim l \lesssim 18$, onde o valor do expoente é $\alpha_{eff}^{\text{DFA}_0} \approx 0,43$. Além disso, o método DFA_1 fornece um platô menor quando comparado com o método DFA_2 , nos intervalos $10 \lesssim l \lesssim 54$ e $17 \lesssim l \lesssim 89$, respectivamente, com uma estimativa do expoente $\alpha_{eff}^{\text{DFA}_{1,2}} \approx 0,47$, onde este

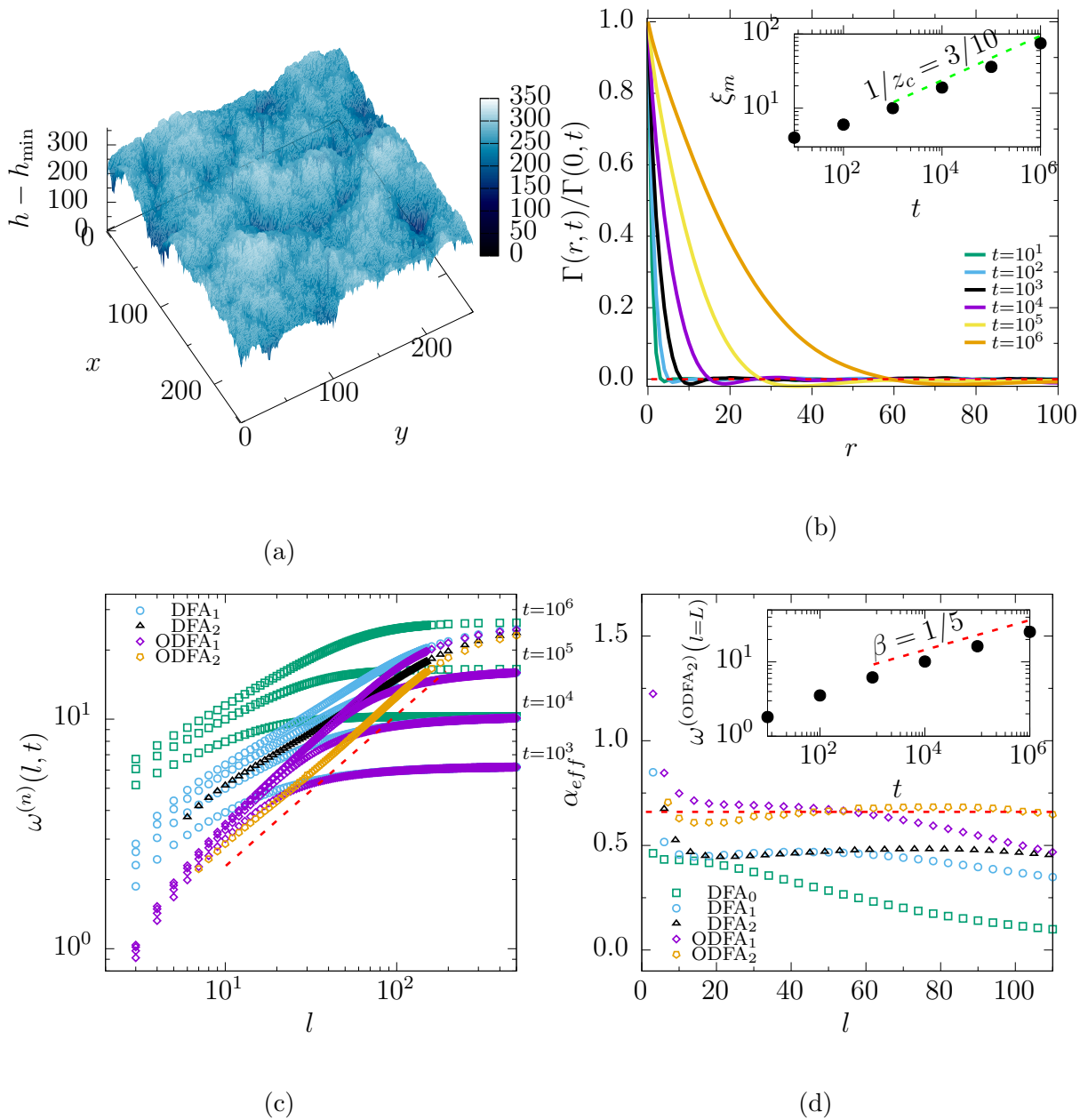


Fig 3.9: (a) Morfologia da superfície gerada com o modelo CV em $t = 10^6$, na qual observa-se formação de morros. (b) Função de auto-correlação altura-altura como função de r . A subfigura mostra a evolução do comprimento lateral médio, obtido com os mínimos da função Γ . (c) Rugosidade local em função do tamanho lateral da janela (l) para diferentes métodos e valores de t . (d) Expoente efetivo de rugosidade local para os diferentes métodos em $t = 10^6$. Cálculos realizados com 100 amostras independentes.

valor é inferior àquele que se espera para este modelo. No entanto, os métodos ODFA₁ e ODFA₂ proveem platôs nos intervalos $25 \lesssim l \lesssim 60$ e $25 \lesssim l \lesssim 100$, nesta ordem, em que um platô maior é obtido com um ajuste polinomial da segunda ordem quando comparado com o da ordem um, com uma estimativa do expoente $\alpha_{eff}^{ODFA_{1,2}} \approx 2/3$, valor estimado para a classe VLDS via RG. O cálculo do comprimento lateral médio do tamanho dos morros

da superfície em $t = 10^6$, utilizando o valor mínimo da função de auto-correlação altura-altura normalizada, é aproximadamente 75, como pode ser verificado no “inset” da Fig. 3.9b. Porém, o método ODFA_n com $n = 1, 2$, consegue extrair o expoente de rugosidade local para o modelo CV, considerando a mínima distância das flutuações na superfície, em valores menores ao comprimento lateral médio dos morros. Ademais, este resultado aumenta a probabilidade de medir o expoente da rugosidade local, em tempos que são considerados experimentalmente acessíveis. O “inset” da Fig. 3.9d mostra a evolução da rugosidade global como uma função de t , onde esta foi calculada usando o método ODFA₂, avaliado em $l = L$, de modo que este resultado obedece à lei de escala descrita na Eq. 2.2 para $t \gtrsim 10^3$, em que o valor do expoente β é consistente com aquele calculado via RG para classe VLDS.

Na escala auto-afim não anômala, a rugosidade local em escalas pequenas da ordem de poucos espaços de rede, se aproxima a um valor finito para longos tempos e suas correções seguem uma lei de potência descrita por

$$\omega^{(0)} = C_1 + C_2 t^{-y}, \quad (3.2)$$

onde C_1 e C_2 , são constantes. Ademais, este mesmo comportamento é exibido pela inclinação quadrática média $|(\nabla h)|^2$ [54, 56, 128, 129]. Para as classes de universalidade, Edwards Wilkinson (EW) [30] e KPZ [29], o expoente y na Eq. 3.2 é determinado de forma analítica, cujas relações são $y_{EW} = d/2$ e $y_{KPZ} = 2(1 - \alpha)/z$, respectivamente [130, 131]. Assis *et al.* [63], apresentaram resultados para o expoente efetivo anômalo no modelo CV e encontraram valores para $0,08 \leq \kappa \leq 0,23$, em que estes são devidos a um efeito transitório, já que a rugosidade local em uma escala pequena se projeta para um valor constante, quando $y = 0,09$, segundo a Eq. 3.2. Na Fig. 3.10a, apresenta-se a evolução da rugosidade local para $l = 5$ com os métodos DFA₀, DFA₁ e ODFA₁, onde valores maiores são observados na rugosidade local com o método DFA₀, quando comparados com DFA₁ e, por sua vez, DFA₁ > ODFA₁. A Fig. 3.10b ilustra a rugosidade local como função de t^{-y} para $l = 5$, com os métodos DFA₀, DFA₁ e ODFA₁, em que $y = 0,09, 0,12$ e $0,23$, respectivamente, mostrando que ODFA₁ possui uma convergência rápida, onde este resultado é outra evidência que o modelo CV exhibe escala normal assintótica, comprovando-se, desta maneira, a conjectura reportada na Ref. [56], em que são investigados outros modelos da classe VLDS. Nesta investigação, encontrou-se que o expoente $y = 0,23$, obtido com o método ODFA₁ é da mesma grandeza ao reportado para o modelo CRSOS na Ref. [56], onde as correções de escala são fracas.

3.2.2 Considerações para 2+1 Dimensões

Nesta investigação, foi aplicado o método ODFA_n sobre superfícies geradas pelo modelo CV, onde existe uma competição da deposição das partículas com a difusão desta na superfície, devido à ativação térmica que gera estruturas irregulares com forma de morros. Neste modelo, o ingrediente dominante é a difusão de partículas na superfície e é esperado que exiba expoentes de rugosidade local pertencentes à classe VLDS. Foi realizada uma comparação utilizando os métodos DFA_n, ODFA_n, para o modelo CV em baixas temperaturas e tempos longos, onde o método ODFA_n para $n = 1, 2$ conseguiu extrair o expoente de rugosidade da classe VLDS, $\alpha = 2/3$, valor esperado para este modelo. Resultados do

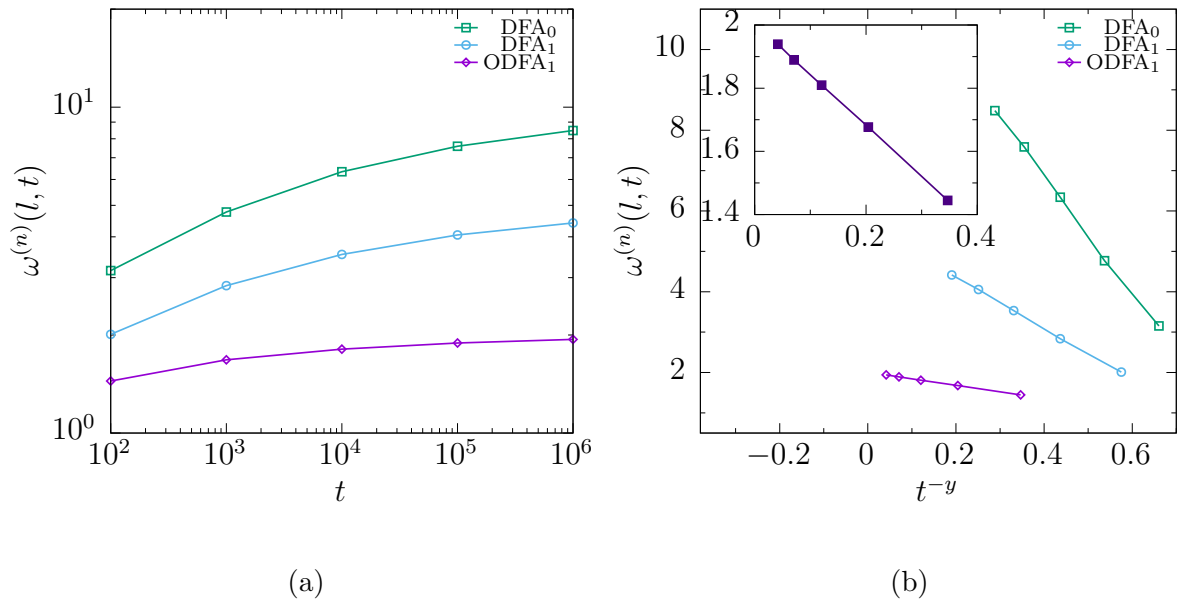


Fig 3.10: (a) Evolução temporal da rugosidade local para uma janela de tamanho lateral $l = 5$, para o modelo CV, usando os métodos DFA₀, DFA₁ e ODFA₁. (b) Transiente de escala anômala para o modelo CV, usando os métodos DFA₀, DFA₁ e ODFA₁, com $y = 0,09$, $0,12$ e $0,23$, respectivamente. O tamanho lateral da janela sobre a qual foi avaliada a rugosidade local $l = 5$. O “inset” apresenta um aumento da escala vertical para o método DFA₁.

transiente de escala anômala dentro de uma janela com tamanho lateral $l = 5$, mostram que estes convergem para um valor constante segundo a equação 3.2, quando são efetuadas correções na escala temporal, com o método ODFA₁, cujo expoente é $y = 0,23$, sendo também observado em outros modelos de tipo VLDS com correções de escala fracas [56]. Este expoente é universal para as classes de universalidade EW e KPZ [130, 135]. Nossos resultados sugerem, assim, que o mesmo é válido para a classe VLDS. Finalmente, esta investigação para o modelo CV com o método ODFA_n foi reportada no jornal *Phys. Rev E* **95**, 042801 (2017).

3.3 Número Médio de Passos

Para estas simulações, usou-se o modelo CV em uma rede cúbica simples com condições periódicas de contorno com tamanho lateral de $L = 512$. As partículas começam a ser depositadas sobre uma condição inicial lisa (substrato) até um tempo t . O número médio de passos ($\langle N_p \rangle$), tem uma dependência com os parâmetros R e ϵ , que por sua vez dependem de E_a , E_b e T (ver seção 2.6.3). $\langle N_p \rangle$ é estimado no intervalo de $45 \leq t \leq 50$, cumprindo a condição de que todas as partículas devem estar aterradas. As simulações foram realizadas sobre 50 realizações independentes, impondo a condição $\sqrt{\langle N_p \rangle} < L$ para garantir que efeitos de tamanho finito do sistema sejam irrelevantes.

Para facilitar a análise dos resultados definimos a variável Υ com $\Upsilon \equiv \log_{10}(R\epsilon^4)$. As simulações computacionais foram realizadas para valores baixos, intermediários e altos da

variável Υ , dentro do intervalo $(-30, 00, 3.00)$. As distribuições de probabilidade para o número médio de passos (P) são calculadas utilizando a relação

$$P(N_p) = \frac{1}{\langle N_p \rangle} \Psi \left(\frac{N_p}{\langle N_p \rangle} \right), \quad (3.3)$$

onde Ψ é uma função de escala e N_p o número de passos.

A Fig. 3.11 ilustra como $P(N_p)$ evolui utilizando a Eq. 3.3. Esta figura mostra um bom colapso por três ordens de magnitude na escala vertical $\log_{10} [\langle N_p \rangle P(N_p)]$. Observa-se um pequeno desvio de $\log_{10} [\langle N_p \rangle P(N_p)]$ para $\Upsilon = -20,64$, correspondendo a um maior $\langle N_p \rangle$ quando comparado com $\Upsilon = -29,82$ e $\Upsilon = -24,07$. A distribuição de número médio de passos segue um comportamento de distribuição estendida quando o produto Re é pequeno e o fato de que $\langle N_p \rangle$ não possui uma escala parecida como a de um modelo em que as partículas se movem uma a uma, fazendo que o problema não seja trivial.

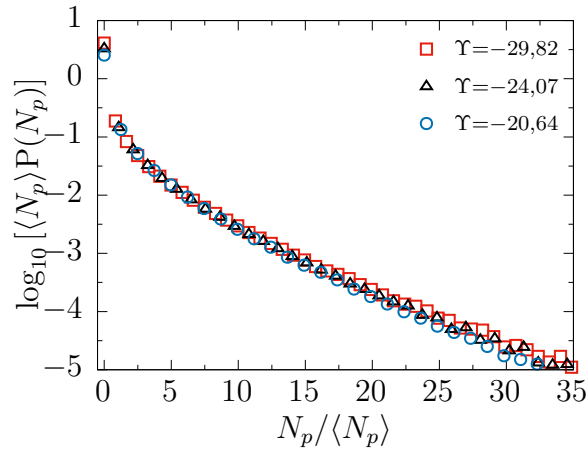


Fig 3.11: Escala da distribuição do número médio de passos para valores baixos de Υ .

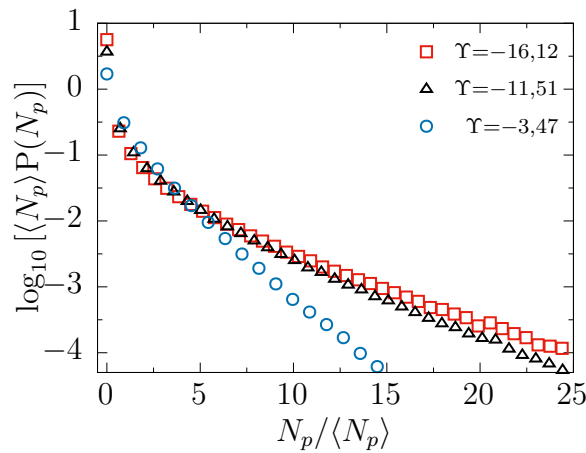


Fig 3.12: Escala da distribuição do número médio de passos para valores intermediários de Υ .

Na Fig. 3.12, pode ser vista a escala $\log_{10} [\langle N_p \rangle P(N_p)]$ para quantidades intermediárias de Υ , em que diferenças significativas são observadas à medida que Υ aumenta. Um colapso das curvas para $\Upsilon = -16, 12$ e $\Upsilon = -11, 12$, é observado por aproximadamente três ordens de $\log_{10} [\langle N_p \rangle P(N_p)]$. No entanto, não se observa um colapso de $\Upsilon = -3.47$, quando comparada com $\Upsilon = -16.12$ e $\Upsilon = -11, 12$. Um aumento considerável na variável Υ leva à mudanças significativas nas distribuições, saindo de uma exponencial estendida e tendendo para uma exponencial normal.

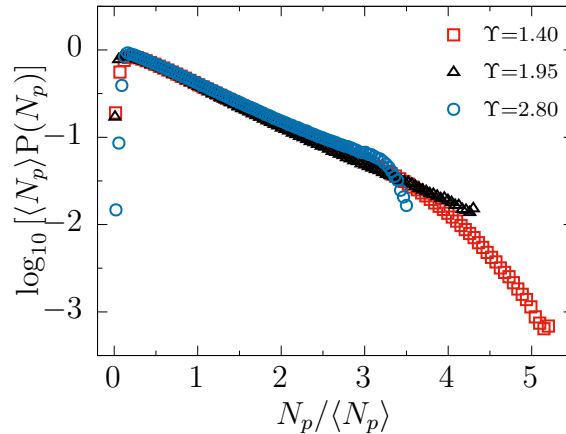


Fig 3.13: Escala da distribuição do número médio de passos para valores altos de Υ .

Na Fig. 3.13, podem ser vistos resultados de $\log_{10} [\langle N_p \rangle P(N_p)]$ para valores altos de Υ , onde um colapso é observado para as distribuições de número médio de passos por aproximadamente uma ordem de $\log_{10} [\langle N_p \rangle P(N_p)]$, onde diferenças são percebidas nas caudas de $\log_{10} [\langle N_p \rangle P(N_p)]$.

Para as distribuições do número médio de passos, propomos uma relação de escala descrita como

$$\langle N_p \rangle \sim R\epsilon^2 \mathfrak{S} [R\epsilon^4], \quad (3.4)$$

onde \mathfrak{S} é uma função de escala.

A Fig. 3.14 mostra o número médio de passos para o conjunto de valores de $10^1 \leq R \leq 10^7$ e $4 \times 10^{-9} \leq \epsilon \leq 0, 11$, escalando de acordo com a Eq. 3.4. Além disso, um regime de decaimento é observado à medida que Υ aumenta, cuja inclinação é de aproximadamente $-0, 5$, seguida de uma transição para um regime constante em valores altos de Υ . Distribuições similares do número médio de passos são observadas para $95 \leq t \leq 100$, e a relação de escala descrita pela Eq. 3.4 também é obedecida.

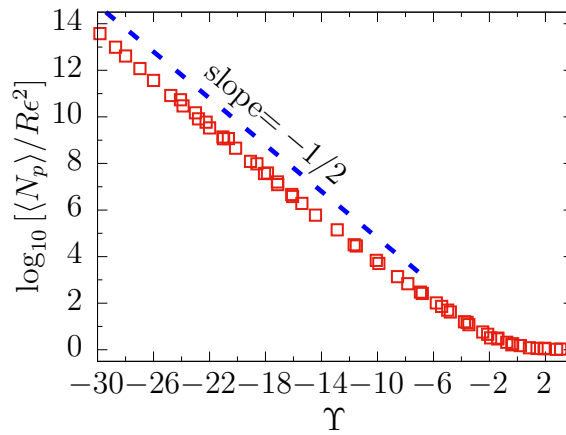


Fig 3.14: Colapso do número médio de passos.

O crossover para um comportamento de altas temperaturas, onde $\langle N_p \rangle \sim R\epsilon^2$, mostra que: não existe um crossover para $\langle N_p \rangle \sim R\epsilon$, o que sugere que o descolamento de um único vizinho não é importante para as leis de escala de $\langle N_p \rangle$, ou seja, o descolamento de um único vizinho não é um evento frequente. Como a superfície não tem longos degraus, nestas condições provavelmente o átomo que descola de um vizinho tende a ficar livre ou seja capturado em um ponto com dois vizinhos laterais, formando um “kink site” (ver Fig. 3.15.).

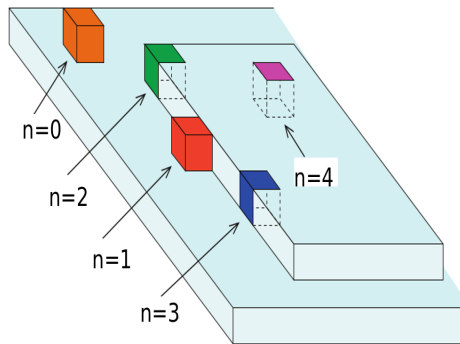


Fig 3.15: Parte de uma superfície com dois terraços e uma variedade de sítios com suas respectivas ligações. Figura retirada e modificada da referência [136]

Quando o descolamento de “kink site” se torna possível, há uma grande quantidade de descolamentos que controlam $\langle N_p \rangle$. Os átomos só conseguem se prender em bordas de degraus.

No caso em que o produto $R\epsilon$ é alto, é possível que apareça um regime em que os degraus não são estáveis. Contudo o número médio de passos seria suficientemente elevado que é necessário redes muito maiores para as simulações.

Capítulo 4

Conclusões

Nesta tese, estudou-se, via simulação computacional, os perfis/superfícies produzidos com os modelos discretos CRSOS, DT, CV que se dizem pertencer à classe VLDS, com o objetivo de determinar o expoente de rugosidade local. Para os tempos considerados neste trabalho os perfis/superfícies produzidos por estes modelos possuem estruturas com forma de morros. Com a forma usual de calcular a rugosidade local, isto é, utilizando DFA_0 não observamos “scaling”. Ademais, os expoentes de rugosidade local efetivos não correspondem aos esperados para a classe VLDS nestes modelos. Para isto, introduzimos um método para medir as flutuações locais, baseado no cálculo da mínima distância desde um ponto no perfil/superfície até um polinômio de ajuste ($ODFA_n$).

Esta medida foi validada usando uma condição inicial criada artificialmente, isto é, utilizando a função Weierstrass, que produz um perfil com comprimento característico (estruturas com forma de morros) e sobre o qual é aplicado o modelo de etching com deposição. Os resultados mostraram que o método $ODFA_2$ consegue extrair um valor do expoente de rugosidade local efetivo $\alpha_{eff} \approx 0,5$. Este valor é corroborado pelo expoente de rugosidade global encontrado para classe KPZ, na qual se acredita que este modelo está enquadrado [77, 109, 120, 122]. Ademais, em resultados sobre superfícies produzidas com o modelo CV em $2 + 1$ dimensões, que possuem comprimento característico, para os tempos de deposição considerados um expoente de rugosidade $\alpha_{eff} \approx 2/3$ é extraído com método $ODFA_{1,2}$, sendo compatível com o calculado usando a teoria de renormalização de grupo para a classe VLDS. Resultados do transiente de escala anômala dentro de uma janela como tamanho lateral $l = 5$ mostram que a rugosidade local converge para um valor constante segundo a equação 3.2, quando são efetuadas correções na escala temporal. Usou-se para esta constatação o método $ODFA_1$, encontrando-se um expoente é $y = 0,23$, o qual também se observa para outros modelos de tipo VLDS com correções de escala fracas [56]. Estes resultados e discussões foram publicados no periódico *Physical Review E* **95**,042801 (2017) (ver apêndice D).

Como consequência da discussão anterior, vimos que este método poderia ser aplicado em outros modelos da classe VLDS em $1 + 1$ dimensões. Para isto, aplicamos o método $ODFA_n$ sobre os perfis criados com os modelos CRSOS, CV e DT, este ultimo considerando também uma situação onde a técnica de redução de ruído é aplicada. Os perfis produzidos por estes três modelos possuem comprimento característico para os tempos de

simulação considerados nesta tese. Expoentes de rugosidade local extraídos com ODFA₂ para estes modelos foram compatíveis com os calculados usando correções de segundo laço da teoria RG, onde $\alpha = 1 - \epsilon$, com $\epsilon = 0,0306$ em 1+1 dimensões. Estes resultados suportam a ausência de anomalia assintótica de rugosidade que foram algumas vezes reportadas nestes modelos [60]. Para o modelo DT, reportamos a primeira evidência da medida do expoente de rugosidade local compatível com aquele da classe VLDS. De fato, no modelo DT original, encontrou-se dois regimes, onde os expoentes de rugosidade local efetivos variam entre $\alpha_{loc}^{DT} = 0,903(1)$ e $\alpha_{loc}^{DT} = 0,976(1)$ este último próximo ao expoente calculado para a classe VLDS $\alpha_{loc}^{VLDS} = 1 - \epsilon$. Quando a técnica de redução de ruído é suficientemente fraca, isto é $m = 4$, uma concordância com o expoente da classe VLDS foi novamente encontrada. Nossos resultados são respaldados por análises teóricas de Haselwandter e Vvedensky [48, 56, 63, 132, 133], que explicam a escala anômala aparente, baseados em análises multiescala de processos atomísticos de superfície. Estes resultados e discussões foram publicados no periódico *Phys. Rev. E* **99**, 022801 (2019) (ver apêndice D).

Em relação ao método ODFA_n, recomenda-se sua utilização para determinar o expoente de rugosidade local em perfis/superfícies que possuem comprimento característico, com estrutura de morros, utilizando polinômios de ajuste com $n = 2$.

Para o número médio de passos, encontrou-se uma distribuição estendida para baixa temperaturas e o fato de que $\langle N_p \rangle$ não possui uma escala parecida como a de um modelo onde as partículas se movem uma a uma fazendo com que o problema seja não trivial. Ademais, para um comportamento de altas temperaturas, onde $\langle N_p \rangle \sim R\epsilon^2$, mostrou-se que não existe um crossover para $\langle N_p \rangle \sim R\epsilon$. Portanto, o descolamento de átomo com um único vizinho não é importante para as leis de escala de $\langle N_p \rangle$, ou seja, o descolamento de um único vizinho não é um evento frequente. Como a superfície não tem longos degraus, nestas condições provavelmente o átomo que descola de um vizinho tende a ficar livre sendo capturado em um sítio com dois vizinhos laterais, formando um “kink site”.

Quando o descolamento de “kink site” se torna possível, há uma grande quantidade de descolamentos que controlam $\langle N_p \rangle$. Os átomos só conseguem não se prender em bordas de degraus (steps edges sites).

Durante o curso de doutorado, ademais, desenvolvemos uma investigação em que propomos um modelo para estudar o crescimento de nanofios a partir do modelo CV, Este modelo constitui-se de um substrato com um catalisador centrado onde a taxa de difusão dos átomos sobre o catalisador é menor, quando comparada à taxa de difusão dos átomos sobre o substrato. Esta diferença leva a uma possível formação de uma estrutura com forma de nanofio. Os resultados obtidos estão na fase de análises e interpretação de resultados.

Como futuras perspectivas, pretende-se realizar uma investigação sobre as superfícies simuladas usando o modelo DT em 2+1 dimensões, onde pretendemos aplicar o método ODFA_n para analisar o expoente de rugosidade local, já que para este modelo, reportou-se, recentemente, que este é descrito pela classe EW [125]. Contudo, os nossos resultados

para 1+1 dimensões mostram que tal modelo é da classe VLDS. Além disso, pretendemos adaptar $ODFA_n$ para determinar distribuições de altura.

Apêndice A

Classe VLDS

Uma técnica experimental amplamente utilizada para manufatura de filmes finos é a epitaxia por feixe molecular (*Molecular Beam Epitaxy*-MBE). Mediante esta técnica, pode-se controlar distintos parâmetros que permitem criar filmes com uma alta qualidade [114]. São vastos os trabalhos que reportam os detalhes técnicos e aplicações desta técnica [115–118]. Desde uma abordagem teórico existe, uma equação estocástica que consegue descrever o crescimento de um filme fino usando esta técnica MBE, com uma boa aproximação. Esta equação foi proposta por Villain [31] e Lai e Das Sarma [32], que visa ser um bom modelo para descrever fenômenos que são dominados por difusão, onde a desorção das partículas não é considerada pela seguinte equação:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = F + \lambda_4 \nabla^2 (\nabla h(\mathbf{x}, t))^2 - \nu_4 \nabla^4 h(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (\text{A.1})$$

onde h corresponde à altura na posição \mathbf{x} e tempo t , λ_4 e ν_4 , são constantes, F representa um fluxo normal de partículas em direção ao substrato. Esta equação tem validade no limite hidrodinâmico ($L \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$), onde apenas são consideradas grandes escalas de comprimento, e os detalhes na escala atômica são ignorados. O termo $\nabla^2 (\nabla h(\mathbf{x}, t))^2$, está associado a uma barreira de difusão simétrica tanto na subida como na descida, desde que a condição SOS seja obedecida no processo de crescimento. $\nabla^4 h(\mathbf{x}, t)$ está associado a uma corrente em direção aos mínimos do potencial químico [119]. $\eta(\mathbf{x}, t)$ representa um ruído gaussiano não conservativo devido às flutuações aleatórias existentes no sistema e este é decorrelacionado no espaço e tempo, em que o primeiro e segundo momento são dados por:

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2A \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (\text{A.2})$$

onde, A representa a amplitude das flutuações da interface e, por sua vez, é proporcional a F , e d é a dimensão associada ao substrato. Soluções para o conjunto de expoentes de escala da Eq. A.2, são encontradas via renormalização de grupo RG (ver Ref. [35]), obtendo que [32]:

$$\beta = \frac{4-d}{8+d}, \quad \alpha = \frac{4-d}{3} \quad \text{e} \quad z = \frac{8+d}{3}. \quad (\text{A.3})$$

Aqui, a dimensão crítica (d_c) é obtida para $d = 4$. Correções de segundo laço foram realizadas para o conjunto de expoentes calculados na Eq. A.3, dando como resultado

[113]

$$\beta = \frac{4 - d - 3\delta}{8 + d - 6\delta}, \quad \alpha = \frac{4 - d}{3} - \delta \quad \text{e} \quad z = \frac{8 + d}{3} - 2\delta, \quad (\text{A.4})$$

em que $\delta = 0.01361(\frac{d_c - d}{2})^2$ [113]. Finalmente a classe VLDS também é conhecida na literatura como a equação de epitaxia por feixe molecular não linear (nMBE).

Apêndice B

Modelo de Etching

O modelo de etching [77, 109, 120] foi originalmente proposto para descrever a dissolução de um sólido por um líquido, sendo baseado na suposição de que a probabilidade por unidade de tempo de uma partícula ser removida é proporcional à área exposta e ao número de átomos livres. Neste modelo, o substrato pode ser modelado em uma rede quadrada bidimensional exposta à dissolução. Isto é justificado pelo fato de que o número de colisões por unidade de tempo entre as moléculas do solvente e as partículas é proporcional à superfície exposta. Para as simulações numéricas em uma dimensão, com λ positivo, em que este termo está associado com a não linearidade na equação KPZ, os seguintes passos acontecem:

- (i) seleciona-se aleatoriamente uma coluna de $i = 1, 2, \dots, L$, para um instante t , onde L é o tamanho lateral do sistema;
- (ii) se $h_i(t+1) = h_i(t) + 1$;
- (iii) se $h_{i-1}(t) < h_i(t) \rightarrow h_{i-1}(t+1) = h_i(t)$;
- (iv) se $h_{i+1}(t) < h_i(t) \rightarrow h_{i+1}(t+1) = h_i(t)$.

As regras anteriormente descritas são ilustradas na Fig. B.1. Resultados reportados na literatura sugerem que os expoentes de escala, para este modelo, são da classe KPZ, tanto para $1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões, respectivamente [77, 109, 120]. Recentemente, uma nova evidencia foi reportada para este modelo em $1 + 1$ dimensões [121, 122].

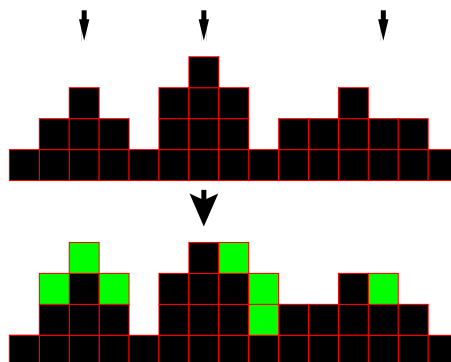


Fig B.1: Regras de crescimento para o modelo de Etching na versão original em $1 + 1$ dimensões, onde as setas indicam a coluna escolhida aleatoriamente. A cor preta representa as partículas depositadas, e a verde as novas partículas.

Apêndice C

Algoritmo de Listas para o Modelo CV

Investigações que usam processos estocásticos para modelar a evolução de sistemas são encontrados em ampla gama de disciplinas. Na ciência dos materiais e física computacional, o método de Kinetic Monte Carlo (KMC) é usado para simular processos estocásticos e crescimento epitaxial de cristais [123, 124]. Um modelo que ajuda a entender o processo de crescimento de filmes via epitaxia por feixe molecular é o modelo CV. No entanto, a eficiência computacional durante o processo de simulação é de alta relevância. À continuação, descreveremos o algoritmo CV com listas:

1. $\hat{c}_n = \exp\left(\frac{-\gamma n}{k_B T}\right)$, sendo \hat{c}_n um vetor, γ a energia associada aos vizinhos laterais e $n = 0, 1, 2, \dots$ número vizinhos laterais.
2. $\hat{\rho}_n = K \exp\left(\frac{-\epsilon}{k_B T}\right) \hat{c}_n$.
3. $H_{i,j} = 0$ condição inicial para a simulação.
4. \hat{L}_n número de partículas com n vizinhos laterais; $X_{\hat{L}_n, n} = i$ e $Y_{\hat{L}_n, n} = j$. Posições das partículas com n vizinhos laterais.
5. Sorteia aleatoriamente as posições i, j sobre $H_{i,j}$ e acrescenta uma unidade a este sítio.
6. Atualiza \hat{L}_n , $X_{\hat{L}_n, n}$ e $Y_{\hat{L}_n, n}$ dependendo dos n vizinhos laterais.
7. $\hat{M}_n = \hat{L}_n \hat{\rho}_n$ calcula o número de movimentos para cada valor de n e realiza a soma total dos movimentos $TM = \sum_{n=0}^n \hat{M}_n$.
 - (a) $\hat{M}_n = \hat{L}_n \hat{\rho}_n$, $TM = \sum_{n=0}^n \hat{M}_n$. e calcula a fração total de movimentos $f_M = (TM)^{-1}$.
 - (b) Sorteia aleatoriamente um número R entre $[0, n]$.
 - (c) Determina a posição associada a n : $jm = \hat{L}_n R$; $i = X_{jm, n}$; $j = Y_{jm, n}$.
 - (d) Atualiza \hat{L}_n , $X_{\hat{L}_n, n}$ e $Y_{\hat{L}_n, n}$.

(e) Se finalizou TM , retorna a 5.

Na Ref. [1], faz-se uma comparação entre algoritmos “search algorithm”, “standard inverted list”, “minimal allocation” e “flexible allocation”, utilizados para simular o crescimento de epitaxia por feixe molecular. Na Fig C.1, apresenta-se uma comparação destes algoritmos. .

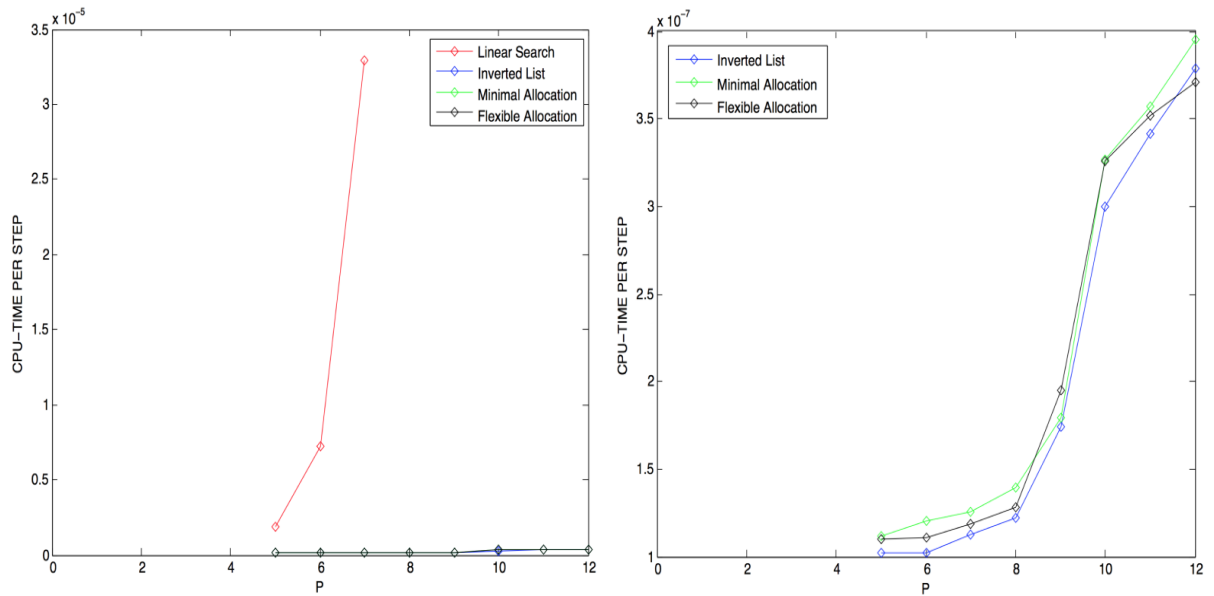


Fig C.1: Tempo de CPU vs p. Figuras retiradas da Ref. [1]

Apêndice D

Artigos Publicados

Optimal detrended fluctuation analysis as a tool for the determination of the roughness exponent of the mounded surfaces

Edwin E. Mozo Luis,^{1,*} Thiago A. de Assis,^{1,†} and Silvio C. Ferreira^{2,‡}

¹*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Campus Universitário da Federação, Rua Barão de Jeremoabo s/n, 40170-115, Salvador; BA, Brazil*

²*Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, Minas Gerais, 36570-900 Viçosa, Brazil*

(Received 15 December 2016; published 12 April 2017)

We present an optimal detrended fluctuation analysis (DFA) and apply it to evaluate the local roughness exponent in nonequilibrium surface growth models with mounded morphology. Our method consists in analyzing the height fluctuations computing the shortest distance of each point of the profile to a detrending curve that fits the surface within the investigated interval. We compare the optimal DFA (ODFA) with both the standard DFA and nondetrended analysis. We validate the ODFA method considering a one-dimensional model in the Kardar-Parisi-Zhang universality class starting from a mounded initial condition. We applied the methods to the Clarke-Vvedensky (CV) model in $2 + 1$ dimensions with thermally activated surface diffusion and absence of step barriers. It is expected that this model belongs to the nonlinear molecular beam epitaxy (nMBE) universality class. However, an explicit observation of the roughness exponent in agreement with the nMBE class was still missing. The effective roughness exponent obtained with ODFA agrees with the value expected for the nMBE class, whereas using the other methods it does not agree. We also characterize the transient anomalous scaling of the CV model and obtained that the corresponding exponent is in agreement with the value reported for other nMBE models with weaker corrections to the scaling.

DOI: [10.1103/PhysRevE.95.042801](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.95.042801)

I. INTRODUCTION

Molecular beam epitaxy (MBE) is a fundamental technique suited to the production of layered materials driven by vapor deposition [1]. In particular, crystal quality requires that each layer is formed before the next one in nonequilibrium surface conditions [1,2], which is achieved at high adatom mobility. At sufficiently high temperatures, the resulting surfaces can be smooth with global roughness no larger than a few nanometers corresponding to one or two atomic layers.

At moderate temperatures, the interface exhibits kinetic roughening [2,3]. If the growth is ruled by surface diffusion, it is expected that the dynamics in the hydrodynamic limit is described by the nonlinear stochastic equation [3]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nu \nabla^4 h + \lambda \nabla^2 (\nabla h)^2 + \eta, \quad (1)$$

where $h(\mathbf{r}, t)$ is the height at position \mathbf{r} and time t measured perpendicularly to a d -dimensional substrate, $\eta(\mathbf{r}, t)$ is a Gaussian, nonconservative noise given by $\langle \eta \rangle = 0$, and $\langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t') \rangle = D \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$, while ν and λ are constants. This equation was independently proposed by Villain [4] and by Lai and Das Sarma [5], being also known as the Villain-Lai-Das Sarma (VLDS) equation, and it is a standard model of the nonlinear molecular beam epitaxy (nMBE) universality class. This equation has been investigated in the framework of renormalization group [6–10], and many features observed in kinetic Monte Carlo simulations have been elucidated.

MBE is often modeled by microscopic transition rules built to capture the atomistic mechanisms. The basic approach is to use stochastic transition rates for atomistic processes such as deposition and thermally activated adatom hopping [11,12]. A fundamental example in this class is the Clarke-Vvedensky (CV) model [13], in which deposition occurs at a constant and uniform rate and the adatom diffusion rate is given by an Arrhenius law in the form $D = \nu_0 \exp(-E/k_B T)$, where ν_0 is an attempt frequency, k_B is the Boltzmann constant, T is the temperature, and E is an energy barrier for the hopping of an adatom with n nearest neighbors (bonds). The activation barrier includes the contribution of the substrate (E_S) and bonds in the same layer (E_N) assuming the form $E = E_S + n E_N$. Renormalization studies [8–10] point out that the CV model belongs to the nMBE class. The presence of step barriers [1] in the CV model, in which the diffusion between different atomic layers is depleted, leads asymptotically to mounded morphologies with non-self-affine structure [12,14].

Some investigations of the dynamic scaling of surface roughness in CV-type models have been reported [15–19]. The interface fluctuation within a window of length l (hereafter called quadratic local roughness) is defined as

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

where $\langle \dots \rangle_i$ denotes averages over the window i . The quadratic local interface roughness $\omega^2(l, t)$ is defined as the average of ω_i^2 over different windows and samples. In self-affine dynamical scaling, the local roughness increases as $\omega \sim t^\beta$ for $t \ll l^z$ and saturates as $\omega \sim l^\alpha$ for $t \gg l^z$, with $z = \alpha/\beta$, and these scaling exponents are called growth (β), roughness (α), and dynamic (z) exponents [3], respectively. If l is chosen to be the system size L , Eq. (2) yields the squared global roughness. Former works on the CV model suggest temperature-dependent exponents and anomalous scaling of

*eluis@ufba.br

†thiagoaa@ufba.br

‡silviojr@ufv.br

the surface roughness [15–17]. Recently, the local roughness of the CV model in $d = 2$ was analyzed, and transient anomalous (non-self-affine) scaling was found [19]. As a consequence, nMBE asymptotical exponents with large corrections to the scaling were conjectured for the CV model, in agreement with other nMBE models [20]. Numerical simulations in $d = 2$ of atomistic models in the nMBE class with weaker corrections to the scaling provide growth and dynamical exponents $\beta \approx 0.2$ and $z \approx 3.33$, respectively [21], in agreement with the one-loop renormalization-group exponents $\beta = 1/5$ and $z = 10/3$ for the VLDS equation [4,5]. These exponents were also found from the scaling analysis of the CV model in Ref. [19].

However, the scaling of the local roughness at short scales does not provide estimates of the roughness exponent in agreement with the universality classes to which they belong for several irreversible growth models in both one- and two-dimensional substrates [22]. This caveat was also observed for the CV model in both irreversible [23] and reversible [19] aggregation versions. Therefore, a direct measurement of the roughness exponent corresponding to the CV model is still lacking.

In the present work, we propose a modification of the standard detrended fluctuation analysis (DFA) [24], in which the height fluctuations are reckoned in terms of the shortest distance to a detrending curve, as a method to calculate the roughness exponent of mounded surfaces. The method was validated with a model in the Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [25] universality class growing from mounded initial conditions and applied to the CV model in the regime exhibiting mounded morphologies. Our method was able to capture fluctuations within length scales smaller than the mound sizes, arising as a promising strategy to unveil the universality classes of models and experiments, in which the most relevant contributions to the fluctuations are within the mounds. This method also provides evidence of transient anomalous scaling in the CV model with the same characteristic exponent observed for other nMBE models with weaker corrections to the scaling.

The paper is organized as follows. In Sec. II, we present basic concepts and definitions of kinetic roughening theory and introduce the optimal DFA (ODFA) method. In Sec. III, we validate the method using the etching model [26], which belongs to the KPZ universality class, for a mounded initial condition. In Sec. IV, we discuss the formation of rough mounds in the CV model and the outcomes obtained with the ODFA method, comparing them with DFA and nondetrended methods. Section V summarizes our conclusions.

II. METHODS

A. Dynamical scaling

We will consider the surface evolution in the growth regime where the global roughness scales as $W = \omega(L, t) \sim t^\beta$. A characteristic surface length can be extracted from the autocorrelation function defined as

$$\Gamma(\mathbf{r}, t) = \langle \tilde{h}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, t) \tilde{h}(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (3)$$

where $\tilde{h} = h - \bar{h}$, \bar{h} is the mean height of the profile, and averages in Eq. (3) are performed over different reference positions \mathbf{r}_0 , different orientations, and independent samples. Surface growth under nonequilibrium conditions may present

mounded morphologies [2,12,27]. In mounded surfaces, the characteristic lateral surface length can be estimated as the first zero (ξ_0) or the first minimum (ξ_m) of the autocorrelation function [1,12,14]. Those lengths are expected to scale as

$$\xi_{0,m} \sim t^{1/z_c}, \quad (4)$$

where z_c is the coarsening exponent that, in the case of self-affine growth, corresponds to the dynamical exponent defined previously.

Under the hypothesis of normal (nonanomalous [19,28,29]) scaling, the local roughness obeys the Family-Vicsek ansatz [30] given by

$$\omega(l, t) \sim t^\beta F\left(\frac{l}{t^{1/z}}\right), \quad (5)$$

where F scales as $F(x) \sim x^\alpha$ for $x \ll 1$ and $F(x) = \text{const}$ for $x \gg 1$, leading to $\omega \sim t^\beta$ for $t \ll l^z$ and $\omega \sim l^\alpha$ for $t \gg l^z$. For anomalous scaling [31], the local roughness follows the modified ansatz

$$\omega(l, t) \sim t^\beta F_{\text{ano}}\left(\frac{l}{t^{1/z}}\right) \quad (6)$$

where $F_{\text{ano}}(x) \sim x^{\alpha_{\text{loc}}}$ if $x \ll 1$ and $F_{\text{ano}}(x) = \text{const}$ for $x \gg 1$. Note that if $\alpha \neq \alpha_{\text{loc}}$, one has $\omega(l, t) \sim l^{\alpha_{\text{loc}}} t^\kappa$, where $\kappa = (\alpha - \alpha_{\text{loc}})/z$ for short scales. Therefore, for anomalous scaling, the amplitude of ω versus l scales as l^κ , in which κ is the anomaly exponent [19,28,29].

B. Optimal DFA

Let us consider the standard DFA method using an n th-order polynomial to detrend the surface [24], referred to here as DFA_n . For the sake of simplicity, we consider one-dimensional cross sections for two-dimensional surfaces. The interface fluctuation within a window i of size l in DFA_n is defined as

$$\omega_i^{(n)} = \langle (\delta^{(n)})^2 \rangle_i^{1/2}, \quad (7)$$

where

$$\delta^{(n)} = h(x) - G_i(x; A_i^{(0)}, A_i^{(1)}, \dots, A_i^{(n)}), \quad (8)$$

with G_i being an n th-order polynomial regression of the interface in the i th window with coefficients $A_i^{(0)}, A_i^{(1)}, \dots, A_i^{(n)}$ obtained using the least-squares method [32]. The local roughness yielded by the DFA_n method $\omega^{(n)}$ is defined considering the average over different windows and samples. We stress that $h(x)$ is the height of the profile with respect to $h = 0$. In the standard local roughness analysis, which corresponds to DFA_0 , the surfaces fluctuations are computed in relation to the average height such that $G_i = A_i^{(0)} = \langle h \rangle_i$.

Now, we introduce the ODFA method. The local roughness in the window i of size l is defined by Eq. (7) with

$$\delta^{(n)} = \min [h(x) - G_i(x; A_i^{(0)}, A_i^{(1)}, \dots, A_i^{(n)})], \quad (9)$$

where “min” represents the minimal distance from the surface point with height $h(x)$ to the polynomial G_i . ODFA_0 corresponds exactly to DFA_0 , but for higher orders they are different. In particular, we can easily verify that $\delta^{(1)} = [h(x) - G_i] \cos(\theta_i)$ is the minimal distance to the detrending curve. Figure 1 shows a schematic representation for DFA_1 and ODFA_1 . The variable θ_i corresponds to the angle between

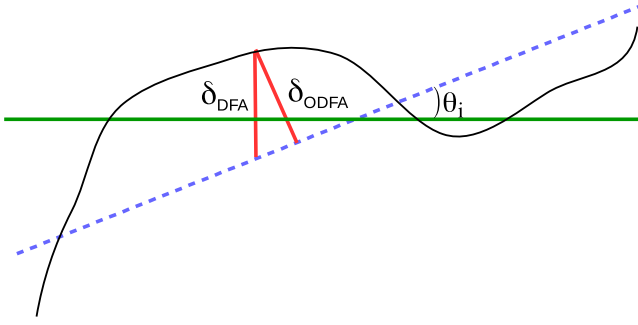


FIG. 1. Schematic representation of DFA₁ and ODFA₁ methods. The dashed line represents the linear regression used to detrend the interface, and the solid line is parallel to the substrate.

substrate and the local trend [$\theta_i = \text{atan}(A_i^{(1)})$]. Observe that for $l \gg 1$, both DFA and ODFA correspond to the global roughness given by Eq. (2) with $l = L$, since the whole surface is not trended. Figure 2 shows the probability that a window of size l has slope θ in a simulation of the CV model (see Sec. IV for simulation details). The distributions are Gaussian and converge to Dirac δ functions centered at $\theta = 0$ as l increases. In higher-order ODFA, the minimal distance can be computed numerically using root-finding algorithms as the bisection method [32] used in the present work.

III. VALIDATING THE ODFA METHOD

To validate the ODFA method and compare it with DFA, we consider the deposition on an initially mounded one-dimensional surface shown in Fig. 3(a). The surface evolves according to the etching model rules [26] in $d = 1$, which belong to the KPZ universality class [25]. This model has a large roughness and also strong corrections to the scaling [33,34], characteristics that make it suitable to perform the tests. The model rules are as follows: at each time step, a site \mathbf{x} is randomly chosen and all nearest neighbors of \mathbf{x} that obey $h(\mathbf{y}) < h(\mathbf{x})$ are increased as $h(\mathbf{y}) \rightarrow h(\mathbf{x})$ and subsequently $h(\mathbf{x}) \rightarrow h(\mathbf{x}) + 1$. The surface preserves its initially mounded structure ($\xi_0 \simeq 1000$) in the whole interval of simulation considered, as shown by the correlation function in the inset of Fig. 3(a).

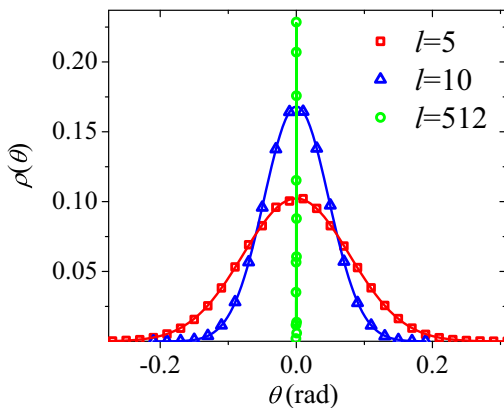


FIG. 2. Distributions of the local slope for different window sizes in a surface obtained with the CV model with $L = 1024$, $t = 100$, using parameters $R = 10$ and $\epsilon = 10^{-2}$.

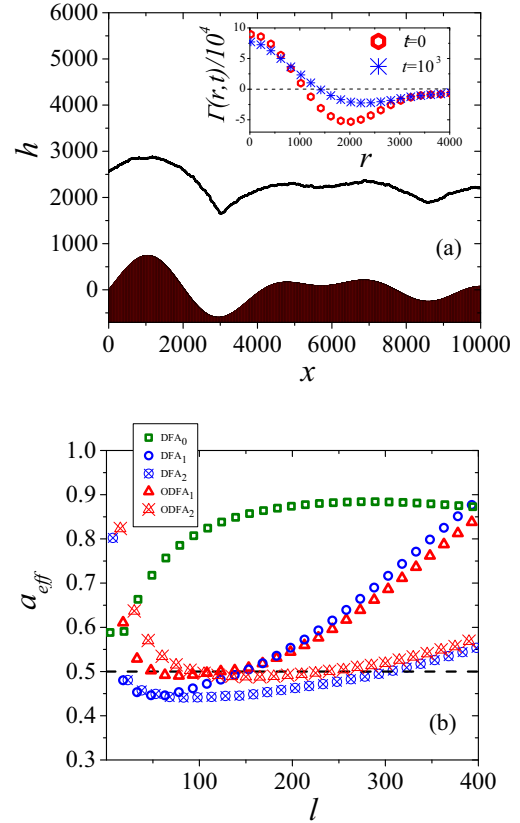


FIG. 3. (a) Mounded initial condition and the (shifted) profile after a deposition time $t = 10^3$ using the etching model. The corresponding correlation functions are shown in the inset. (b) Effective local roughness exponent as a function of the window size for a deposition time $t = 10^3$ using different methods. The horizontal dashed line indicates the value of the KPZ roughness exponent $\alpha_{\text{KPZ}} = 1/2$.

Figure 3(b) compares the effective exponent analyses for the local interface roughness using nondetrended analysis (DFA₀), DFA, and ODFA up to second order. The effective roughness exponent α_{eff} is defined as $\alpha_{\text{eff}} \equiv d \ln(\omega^{(n)}) / d \ln(l)$. DFA₀ leads to a large exponent, typical of mounded surfaces, because it is dominated by the long-wavelength scales and it does not capture the local fluctuations. The DFA₁ analysis provides a plateau at $\alpha_{\text{eff}} = 0.44$ below the exactly known value $\alpha_{\text{KPZ}} = 1/2$ [25]. Using DFA₂, we observe an increasing of the plateau, but no significant improvement of the exponent value is found. For the ODFA method, however, we observe a plateau at $\alpha = 0.49$ very close to the KPZ exponent $1/2$ with a larger plateau for ODFA₂. We stress that, in scales larger than the average mound length, the values of the effective roughness exponent reflect the geometrical aspects of the mounded surface, i.e., $\alpha_{\text{eff}} > 0.5$ is expected.

IV. RESULTS FOR THE CV MODEL IN $d = 2$

We performed simulations of the CV model in a simple cubic lattice, with an initially flat substrate at $h = 0$ of lateral size L . Periodic boundary conditions along the substrate directions are considered. Deposition occurs with a flux normal

to the substrate of F atoms per site per unit of time under a solid-on-solid condition. The ratio

$$R \equiv \frac{D_0}{F}, \quad (10)$$

in which $D = D_0 \epsilon^n$ is the hopping rate if an adatom has n lateral neighbors, is a control parameter of the model. Here, $D_0 = v_0 \exp(-E_s/k_B T)$ is the hopping rate of an adatom with no lateral bond, and $\epsilon = \exp(-E_N/k_B T)$. One time unit corresponds to the deposition of L^2 adatoms, fixing $F = 1$ without loss of generality. In a deposition event, the atom is adsorbed on the top of the previously deposited adatom or the substrate site to grant the solid-on-solid condition. For the same reason, only adatoms at the top of the columns are mobile and perform random hopping toward the top of their nearest-neighbor sites.

We performed simulations of the CV model for $R = 10$ and $\epsilon = 10^{-2}$, which corresponds to a low-temperature regime. This leads to a high surface roughness and allows for a more accurate scaling analysis since the higher-temperature regimes are dominated by layer-by-layer growth [1,14] during an exceedingly long transient. The substrate has lateral size $L = 1024$, assuring that the system is still in the growth regime for the analyzed times. This parameter set was used in all results presented in this work, but we stress that other values with the same order of magnitude were studied, and the conclusions presented hereafter still hold.

Figure 4(a) shows a typical surface morphology after the deposition of 10^6 layers generated by simulations of the CV model. The average size of the mounds was estimated using the first minimum of the autocorrelation function, as shown in Fig. 4(b). After an initial transient ($t \gtrsim 10^3$), a scaling regime $\xi_m \sim t^{1/z_c}$ is observed with an exponent in agreement with $1/z = 0.3$ of the nMBE class, as can be seen in the inset of Fig. 4(b), confirming that this lateral characteristic length has the same scaling as the correlation length in this regime.

Figure 5(a) compares the local roughnesses using DFA and ODFA methods at different times. In Fig. 5(b), the effective roughness exponent is shown as a function of l for $t = 10^6$. The analysis for ODFA₁ provides a plateau for $\alpha_{\text{eff}} \approx 2/3$ for the range $25 \lesssim l \lesssim 60$. A larger plateau is observed for ODFA₂. We can see, for the time intervals considered, that DFA up second order provides estimates of the roughness exponent below the value expected for the nMBE class. Only the sizes of the plateaus are increased for DFA₂, similarly to the behavior observed for the etching model in Fig. 3.

From Fig. 4(b), we obtain that the average size of the mounds at $t = 10^6$ is $\xi_m \approx 75$. Therefore, ODFA methods indicate that the nMBE roughness exponent can be extracted from the CV model considering fluctuations with optimal (minimal) distance to the local trending within scales up to the same order of the mound size. This result is particularly useful and raises the possibility of measuring the roughness exponent for experimentally accessible times. The inset of Fig. 5(b) shows the global roughness against time computed using ODFA₁ (similar curves were obtained for DFA and ODFA₂) for $l = L$. The results provide $\omega \sim t^{0.2}$ for $t \gtrsim 10^3$, which is fully consistent with the nMBE growth exponent.

Now, we address the transient anomalous scaling of the CV model. In self-affine (nonanomalous) scaling, the local

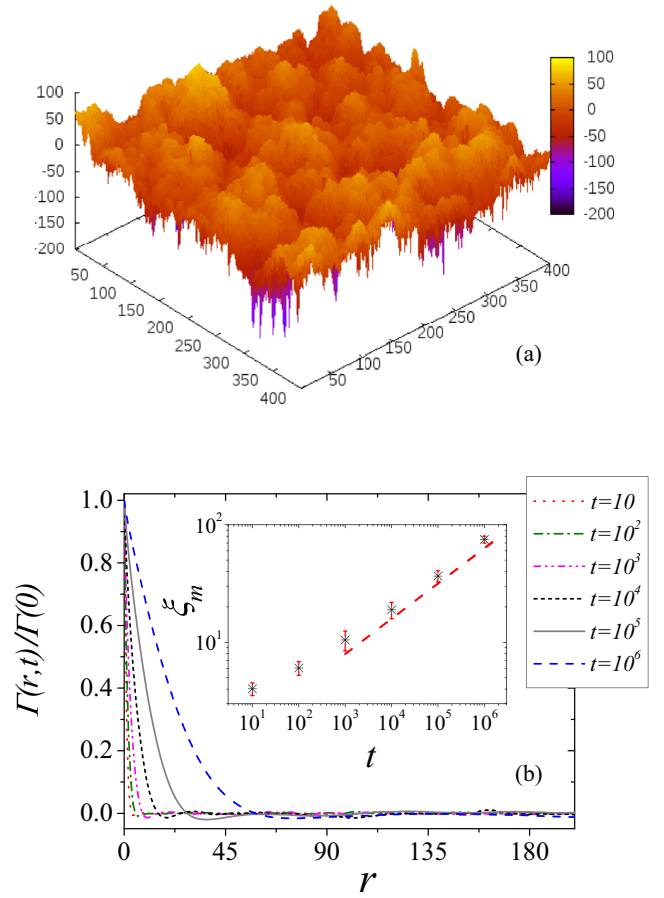


FIG. 4. (a) Typical morphology of a surface generated with the CV model, at deposition time $t = 10^6$, showing the formation of mounds. (b) Scaled autocorrelation function $\Gamma(r,t)/\Gamma(0)$ vs distance r . The inset shows the time evolution of the characteristic length given by the minimum of the autocorrelation function. The dashed line has a slope 0.30.

roughness at very short scales (of order of just a few lattice spaces) approaches a finite value at long times following a power-law correction given by

$$\omega^{(0)} = C_1 + C_2 t^{-y}, \quad (11)$$

where C_1 and C_2 are constants. This is the same behavior of the average squared local slope $|\langle \nabla h \rangle|^2$ [20]. For the Edwards-Wilkinson (EW) [35] and KPZ [25] equations, the values of the exponent y were computed analytically as $y_{\text{EW}} = d/2$ and $y_{\text{KPZ}} = 2(1 - \alpha)/z$, respectively [36,37]. In Ref. [19], it was shown that the effective anomaly exponent in the range $0.08 \leq \kappa \leq 0.23$ observed for the CV model is due to a transient effect since the local roughness for a very small scale approaches a constant value according to Eq. (11) with $y = 0.09$.

The local roughness for a window of size $l = 5$ is shown as a function of t^{-y} in Fig. 6 for DFA₀, DFA₁, and ODFA₁, considering $y = 0.09$, 0.12, and 0.23, respectively, showing that the convergence to a constant value is quicker for ODFA₁. This is additional evidence that the CV model exhibits asymptotically normal scaling, corroborating the conjecture of Ref. [20] where other models of the nMBE class were

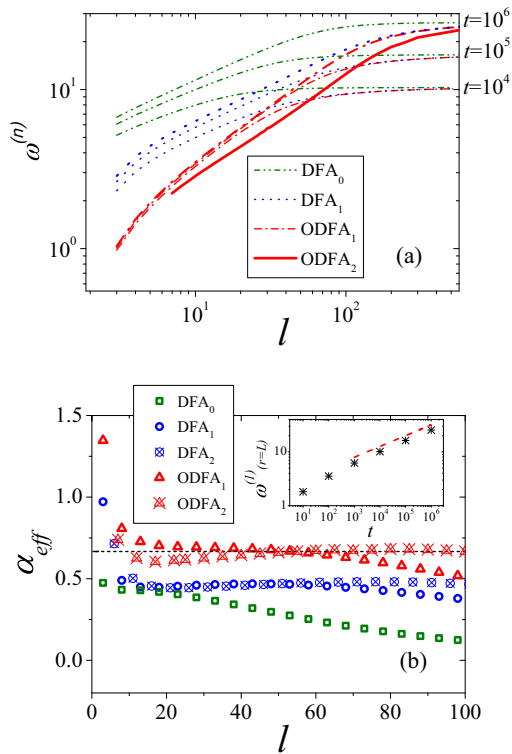


FIG. 5. (a) Local roughness using different methods as a function of the window size for different times. (b) Effective local roughness exponent [$\alpha_{eff} \equiv d \ln(\omega^{(n)})/d \ln(l)$] analysis for different methods at a deposition time $t = 10^6$. The horizontal dashed line indicates the value of the nMBE roughness exponent $\alpha_{nMBE} = 2/3$. The inset shows the time evolution of the global roughness obtained with ODFA₁, and the dashed line has a slope 0.20.

investigated. It is worth noticing that the exponent $y = 0.23$ found with ODFA₁ is the same as that found in the conserved restricted solid-on-solid (CRSOS) model [20], where scaling corrections are weaker.

Finally, we notice that ODFA _{n} , with $n \geq 1$, also works for self-affine surfaces, and improved results were obtained

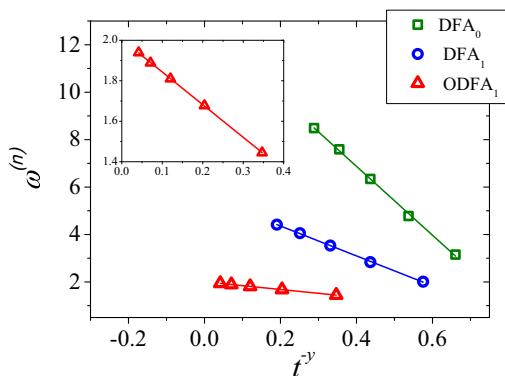


FIG. 6. Transient anomalous scaling analysis for the CV model using different methods: DFA₀, DFA₁, and ODFA₁ with $y = 0.09$, 0.12 , and 0.23 , respectively. The window size used to compute the local roughness is $l = 5$. The inset represents a zoom of the vertical scale improving the visibility of the ODFA₁ curve.

as compared with DFA₀. However, no significant differences were observed as compared with DFA _{n} . Therefore, we propose that using ODFA in experimental and computational procedures is indicated since it is equivalent to standard DFA in self-affine growth, but it captures better the nature of the fluctuations of mounded surfaces.

V. CONCLUSIONS

In this work, we investigated a detrended fluctuation analysis in which the height fluctuations are taken with respect to the optimal (minimal) distance from the detrending curve. This modification was observed to be irrelevant for the determination of the roughness exponents of purely self-affine surfaces, but it matters for systems with transient mounded behavior. Such systems encompass models belonging to the important universality class of nonlinear molecular beam epitaxy. The method was validated and compared with standard DFA analysis using a one-dimensional growth model with a well-known roughness exponent.

We applied the method to the Clarke-Vvedensky model, in which deposition competes with thermally activated surface diffusion producing interfaces with rough mounds. Since this model possesses the central mechanisms of the nMBE class, one expects that it exhibits the nMBE exponents. We compared the present method with nondetrended and standard DFA analyses for the CV model at low temperature and long times. A roughness exponent in agreement with the nMBE universality class ($\alpha_{nMBE} = 2/3$) was observed only for ODFA. We also investigated the transient anomalous scaling, in which the local roughness within small windows converges to a constant value with a power-law correction in time, Eq. (11), and we found that the ODFA method yields the same exponent $y = 0.23$ observed for other nMBE models with weaker corrections to the scaling [20]. Since this exponent is universal for other universality classes, namely EW and KPZ [36,37], our results indicate that the same holds for the nMBE class.

The reason why the ODFA method is more efficient than DFA is intuitively simple since the natural distance to a deterministic referential is the minimal one, as illustrated in Fig. 1. The larger distances to the detrending curve in DFA introduce subleading corrections that are relevant in experimentally and computationally accessible times and sizes, for which the surface actually does not reach its asymptotic dynamical behavior.

We expect that our results will be of relevance for experimental analyses in which mounded morphologies are commonly observed [1] and the resolution of the universality class is challenging. As a different perspective, it would be interesting to consider the role played by the intrinsic smoothing of the surfaces obtained by the widely used scanning probe microscopy techniques, which can interfere markedly in the determination of the roughness exponent [38], and it can even indicate a misleading universality class [39].

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the financial support of the Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). S.C.F. gratefully acknowledges the financial support of Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas

Gerais (FAPEMIG). E.E.M.L. acknowledges the support by Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível

Superior (CAPES). T.A.d.A. thanks F. D. A. Aarão Reis and J. G. V. Miranda for fruitful discussions.

-
- [1] J. Evans, P. Thiel, and M. Bartelt, Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds, *Surf. Sci. Rep.* **61**, 1 (2006).
- [2] T. Michely and J. Krug, *Islands, Mounds and Atoms*, Springer Series in Surface Sciences (Springer, Berlin, 2012).
- [3] A. Barabási and H. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [4] J. Villain, Continuum models of crystal growth from atomic beams with and without desorption, *J. Phys. I France* **1**, 19 (1991).
- [5] Z.-W. Lai and S. Das Sarma, Kinetic Growth with Surface Relaxation: Continuum Versus Atomistic Models, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2348 (1991).
- [6] H. K. Janssen, On Critical Exponents and the Renormalization of the Coupling Constant in Growth Models with Surface Diffusion, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1082 (1997).
- [7] T. Singha and M. K. Nandy, A renormalization scheme and skewness of height fluctuations in $(1 + 1)$ -dimensional VLDS dynamics, *J. Stat. Mech.* (2016) 023205.
- [8] C. A. Haselwandter and D. D. Vvedensky, Fluctuation regimes of driven epitaxial surfaces, *Europhys. Lett.* **77**, 38004 (2007).
- [9] C. A. Haselwandter and D. D. Vvedensky, Renormalization of stochastic lattice models: Epitaxial surfaces, *Phys. Rev. E* **77**, 061129 (2008).
- [10] C. A. Haselwandter and D. D. Vvedensky, Renormalization of atomistic growth models, *Int. J. Mod. Phys. B* **22**, 3721 (2008).
- [11] D. D. Vvedensky, Multiscale modeling of nanostructures, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, R1537 (2004).
- [12] F. F. Leal, S. C. Ferreira, and S. O. Ferreira, Modelling of epitaxial film growth with an Ehrlich-Schwoebel barrier dependent on the step height, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 292201 (2011).
- [13] S. Clarke and D. D. Vvedensky, Growth kinetics and step density in reflection high-energy electron diffraction during molecular-beam epitaxy, *J. Appl. Phys.* **63**, 2272 (1988).
- [14] F. F. Leal, T. J. Oliveira, and S. C. Ferreira, Kinetic modelling of epitaxial film growth with up- and downward step barriers, *J. Stat. Mech.* (2011) P09018.
- [15] P. I. Tamborenea and S. Das Sarma, Surface-diffusion-driven kinetic growth on one-dimensional substrates, *Phys. Rev. E* **48**, 2575 (1993).
- [16] S. Das Sarma, C. J. Lanczycki, R. Kotlyar, and S. V. Ghaisas, Scale invariance and dynamical correlations in growth models of molecular beam epitaxy, *Phys. Rev. E* **53**, 359 (1996).
- [17] M. Kotrla and P. Šmilauer, Nonuniversality in models of epitaxial growth, *Phys. Rev. B* **53**, 13777 (1996).
- [18] B. Meng and W. Weinberg, Dynamical Monte Carlo studies of molecular beam epitaxial growth models: Interfacial scaling and morphology, *Surf. Sci.* **364**, 151 (1996).
- [19] T. A. de Assis and F. D. A. Aarão Reis, Dynamic scaling and temperature effects in thin film roughening, *J. Stat. Mech.* (2015) P06023.
- [20] F. D. A. Aarão Reis, Normal dynamic scaling in the class of the nonlinear molecular-beam-epitaxy equation, *Phys. Rev. E* **88**, 022128 (2013).
- [21] F. D. A. Aarão Reis, Numerical study of discrete models in the class of the nonlinear molecular beam epitaxy equation, *Phys. Rev. E* **70**, 031607 (2004).
- [22] A. Chame and F. Aarão Reis, Scaling of local interface width of statistical growth models, *Surf. Sci.* **553**, 145 (2004).
- [23] T. A. de Assis and F. D. A. Aarão Reis, Thin film deposition with time-varying temperature, *J. Stat. Mech.* (2013) P10008.
- [24] C.-K. Peng, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. Simons, H. E. Stanley, and A. L. Goldberger, Mosaic organization of dna nucleotides, *Phys. Rev. E* **49**, 1685 (1994).
- [25] M. Kardar, G. Parisi, and Y.-C. Zhang, Dynamic Scaling of Growing Interfaces, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
- [26] B. A. Mello, A. S. Chaves, and F. A. Oliveira, Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid, *Phys. Rev. E* **63**, 041113 (2001).
- [27] K. J. Caspersen, A. R. Layson, C. R. Stoldt, V. Fournee, P. A. Thiel, and J. W. Evans, Development and ordering of mounds during metal(100) homoepitaxy, *Phys. Rev. B* **65**, 193407 (2002).
- [28] J. M. López, Scaling Approach to Calculate Critical Exponents in Anomalous Surface Roughening, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4594 (1999).
- [29] F. S. Nascimento, S. C. Ferreira, and S. O. Ferreira, Faceted anomalous scaling in the epitaxial growth of semiconductor films, *Europhys. Lett.* **94**, 68002 (2011).
- [30] F. Family and T. Vicsek, Scaling of the active zone in the eden process on percolation networks and the ballistic deposition model, *J. Phys. A* **18**, L75 (1985).
- [31] J. M. López, M. A. Rodríguez, and R. Cuerno, Superroughening versus intrinsic anomalous scaling of surfaces, *Phys. Rev. E* **56**, 3993 (1997).
- [32] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, 3rd ed. (Cambridge University Press, New York, 2007).
- [33] T. J. Oliveira, S. G. Alves, and S. C. Ferreira, Kardar-Parisi-Zhang universality class in 2+1 dimensions: Universal geometry-dependent distributions and finite-time corrections, *Phys. Rev. E* **87**, 040102(R) (2013).
- [34] I. S. S. Carrasco, K. A. Takeuchi, S. C. Ferreira, and T. J. Oliveira, Interface fluctuations for deposition on enlarging flat substrates, *New J. Phys.* **16**, 123057 (2014).
- [35] S. F. Edwards and D. R. Wilkinson, The surface statistics of a granular aggregate, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **381**, 17 (1982).
- [36] J. Krug and P. Meakin, Universal finite-size effects in the rate of growth processes, *J. Phys. A* **23**, L987 (1990).
- [37] Y.-L. Chou and M. Pleimling, Kinetic roughening, global quantities, and fluctuation-dissipation relations, *Physica A* **391**, 3585 (2012).
- [38] F. Lechenault, G. Pallares, M. George, C. Rountree, E. Bouchaud, and M. Ciccotti, Effects of Finite Probe Size on Self-Affine Roughness Measurements, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 025502 (2010).
- [39] S. G. Alves, C. I. L. de Araujo, and S. C. Ferreira, Hallmarks of the Kardar-Parisi-Zhang universality class elicited by scanning probe microscopy, *New J. Phys.* **18**, 093018 (2016).

Local roughness exponent in the nonlinear molecular-beam-epitaxy universality class in one dimension

Edwin E. Mozo Luis,^{1,*} Thiago A. de Assis,^{1,†} Silvio C. Ferreira,^{2,3,‡} and Roberto F. S. Andrade^{1,3,§}

¹*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Campus Universitário da Federação,
Rua Barão de Jeremoabo s/n, 40170-115, Salvador, BA, Brazil*

²*Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, Minas Gerais, 36570-900, Viçosa, Brazil*

³*National Institute of Science and Technology for Complex Systems, 22290-180, Rio de Janeiro, Brazil*



(Received 10 December 2018; published 1 February 2019)

We report local roughness exponents, α_{loc} , for three interface growth models in one dimension which are believed to belong to the nonlinear molecular-beam-epitaxy (nMBE) universality class represented by the Villain-Lais-Das Sarma (VLDS) stochastic equation. We applied an optimum detrended fluctuation analysis (ODFA) [Luis *et al.*, *Phys. Rev. E* **95**, 042801 (2017)] and compared the outcomes with standard detrending methods. We observe in all investigated models that ODFA outperforms the standard methods providing exponents in the narrow interval $\alpha_{\text{loc}} \in [0.96, 0.98]$ quantitatively consistent with two-loop renormalization group predictions for the VLDS equation. In particular, these exponent values are calculated for the Clarke-Vvedensky and Das Sarma-Tamborenea models characterized by very strong corrections to the scaling, for which large deviations of these values had been reported. Our results strongly support the absence of anomalous scaling in the nMBE universality class and the existence of corrections in the form $\alpha_{\text{loc}} = 1 - \epsilon$ of the one-loop renormalization group analysis of the VLDS equation.

DOI: [10.1103/PhysRevE.99.022801](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.022801)

I. INTRODUCTION

Kinetic roughening is an important feature related to the growth of interfaces under nonequilibrium conditions [1,2]. In many systems under specified conditions, including that of molecular-beam-epitaxy (MBE) experiments, the surface diffusion may be a ruling mechanism competing with the deposition [1,3]. Stochastic modeling of MBE is a front-line scientific issue since it corresponds to a technique to produce high-quality thin films for many applications [3,4]. In the simplest cases, the modeling assumes a limited mobility of adatoms. Some examples include the conservative restricted solid-on-solid (CRSOS) [5,6] and the Das Sarma and Tamborenea (DT) [7] models, in which short-range surface diffusion and permanent aggregation take place after adsorption. More realistic models include thermally activated processes where the mobility is not limited. A noteworthy one is the Clarke-Vvedensky (CV) model [8–11], in which the adatom diffusion rates follow Arrhenius laws, with energy barriers depending on the local number of bonds. Recently, the scaling properties of a limited-mobility model were compared with the CV model [12], discussing the effects of memory (non-Markovianity) and probabilities of adatom detachment from terrace steps. It was observed that many central features of thermally activated models can be captured with their limited mobility versions [12].

The CRSOS [13], DT [7,14], and CV [8,9,11] models are connected with the nonlinear molecular-beam-epitaxy (nMBE) universality class, since the surface dynamic is ruled by adatom diffusion. If the incoming particle flux is omitted, then the corresponding nMBE growth equation, also called Villain-Lai-Das Sarma (VLDS) [15,16], is given by

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nu_4 \nabla^4 h + \lambda_4 \nabla^2 (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

where h corresponds to the height, at the position \mathbf{x} and time t , with respect to the initial d -dimensional substrate; ν_4 and λ_4 are constants; and $\eta(\mathbf{x}, t)$ is a nonconservative Gaussian noise.

In this work, we investigate interface growth on one-dimensional substrates. The growth (β) and the dynamical (z) exponents are used as benchmarks to describe the interface scale invariance [1]. The former exponent characterizes how height fluctuations ω while the latter how the characteristic correlation length ξ evolve, usually obeying scaling laws of the forms $\omega \sim t^\beta$ and $\xi \sim t^{1/z}$, respectively. The global roughness exponent $\alpha = \beta z$ can also be used in the regime where the correlation length is much larger than the scale of observation L when $\omega \sim L^\alpha$ [1,17]. According to a dynamical one-loop renormalization-group (RG) analysis of Eq. (1), the roughness and dynamic exponents are given by $\alpha = (4 - d)/3$ and $z = (8 + d)/3$. However, Janssen [18] pointed out that this conclusion was derived from an ill-defined transformation and there would be higher-order corrections. For instance, small negative corrections to α and z were reported in all dimensions from a two-loop calculation [18]. In the particular case of $d = 1$ with nonconservative noise we have $\alpha = 1 - \epsilon$ with $\epsilon = 0.0306$ [18]. These corrections are supported by numerical results for CRSOS model [19], in which

*eluis@ufba.br

†thiagoaa@ufba.br

‡silviojr@ufv.br

§randrade@ufba.br

$\alpha = 0.94(2) < 1$, being the right-hand side of the inequality the predicted value by the one-loop RG analysis $\alpha = 1$.

Nonetheless, several investigations of nMBE lattice models formerly suggested that the local and global height fluctuations scale with different local and global roughness exponents, characterizing an anomalous scaling [20,21]. To define this phenomenon, let us consider the interface fluctuations within a window of length r and at time t (hereafter called quadratic local roughness),

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

where $\langle \dots \rangle_i$ means averages over the window i . The quadratic local interface roughness $\omega^2(r, t)$ is defined considering the average of ω_i^2 over different windows and independent realizations. In normal dynamical scaling, in which the Family-Vicsek ansatz [17] holds, the local roughness for a window of length r increases as $\omega \sim t^\beta$ for $t \ll r^z$ and saturates as $\omega \sim r^{\alpha_{\text{loc}}}$ for $t \gg r^z$, with $z = \alpha_{\text{loc}}/\beta$. The exponent α_{loc} is the local roughness or Hurst exponent [1]. Anomalous scaling happens when local and global roughness exponents are different, implying that the local roughness presents dependence on both window size and time at short scales given by $\omega(r, t) \sim r^{\alpha_{\text{loc}}} t^\kappa$ with $\kappa = (\alpha - \alpha_{\text{loc}})/z$.

Anomalous scaling was reported in theoretical analyzes of epitaxial surface growth and numerical integration of the VLDS equation in $d = 1$ and 2 [22]. Mound formation was claimed to justify the anomalous scaling, which contrasts with the conclusions reported in Refs. [20,23], according to which normal scaling should occur in local growth processes. Crystalline mounds have been also used to justify anomalous scaling in experiments [24], while the interplay between nonlocal strain and substrate disorder was pointed out as a mechanism involved in the anomalous scaling in epitaxial growth of semiconductor CdTe films [25,26].

Haselwandter and Vvedensky found that the VLDS equation may exhibit a long transient close to an unstable RG fixed point that would explain an apparent anomalous scaling observed in many simulations [27–29]. In the context of lattice models, it was reported an apparent anomalous scaling at short times which asymptotically turns into normal scaling for the CRSOS model [23]. The local roughness exponent of the DT model was reported to be $\alpha_{\text{loc}} \approx 0.7$ in $d = 1$ [30,31]. This value is different from the global roughness exponent $\alpha = 1 - \epsilon$ predicted in the RG analysis of the VLDS equation, which might suggest anomalous roughening [32,33]. However, the local roughness distributions [23] suggest that the one-dimensional DT model has normal scaling, in agreement with the predictions of dynamic RG analysis for local growth process without quenched disorder or additional symmetries [20]. Thus, the DT model remains controversial and a careful consideration regarding their local roughness exponents, especially without noise-reduction techniques [34–36], is worthwhile.

An evaluation of α_{loc} for CV model in two dimensions, in agreement with the nMBE class, was recently reported [37]. The effective roughness exponent was calculated with the optimal detrended fluctuation analysis (ODFA), while the exponents obtained with other methods did not match with those of the nMBE class [37]. This result provided support for nonanomalous asymptotic scaling in the CV model, corroborating

the claim that this transient effect is a consequence of large corrections to the asymptotic normal scaling [11]. However, an explicit observation of the local roughness exponent for the CV model in $d = 1$ is still missing.

Motivated by the aforementioned studies, we present an analysis of the local roughness exponent for CRSOS, DT, and CV models in one-dimension using the ODFA method. Our results show that the second-order ODFA method suitably yields values of α_{loc} consistent with the nMBE class for CRSOS and CV models. Moreover, the obtained exponents corroborate the existence of corrections in the one-loop RG [18]. For DT models, the ODFA method also provides values in agreement with nMBE class specially in the case of mild noise reductions [34–36]. In the original DT, two scaling regimes were observed: At short scales we report $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{DT})} \approx 0.90$ and at intermediary ones $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{DT})} \approx 0.97$, both considerably closer to the nMBE class than the values found with other methods. The results presented here are consistent with the conjecture of Ref. [20], which argues that intrinsic anomalous roughening cannot occur in local growth models.

The rest of this paper is organized as follows. In Sec. II, we present the models and basic concepts involved in this work. In Sec. III, we discuss the limits where the ODFA method outperforms other methods, considering mounded initial conditions. In Sec. IV, the scaling of surface roughness is analyzed and the local roughness exponent is reported. In Sec. V, we summarize our conclusions and prospects.

II. MODELS AND BASIC CONCEPTS

The lattice models studied in this work are the CRSOS, DT, and CV. All simulations were performed on a initially flat one-dimensional substrate with L sites and periodic boundary conditions. One time unit corresponds to the deposition of L adatoms. In all models, deposition occurs with rate $F = 1$ in a flux normal to the substrate and obeys a solid-on-solid condition [1].

In the CRSOS model, a site is randomly chosen for one adatom deposition. The height differences δh between nearest neighbors obey the restriction $\delta h \leq \delta H_{\text{max}}$. We consider the case $\delta H_{\text{max}} = 1$. If this condition is satisfied for the randomly chosen incidence site, then the particle permanently sticks there. Otherwise, it searches the nearest position where the condition is satisfied, which becomes the place of deposition. In the case of multiple options, one of them is randomly chosen.

In the CV model, deposition occurs at a constant and uniform rate while the adatom diffusion rate is given by an Arrhenius law in the form $D = \nu_0 \exp(-E/k_B T)$, where ν_0 is an attempt frequency, k_B the Boltzmann constant, and E is an energy barrier for the hopping, which includes the contribution of the substrate (E_S) and lateral bonds (E_N) assuming the form $E = E_S + nE_N$. The ratio $R = D_0/F$, in which $D = D_0 \eta^n$ is the hopping rate if an adatom has n lateral neighbors, is a control parameter of the model [11,37]. In this work we use $R = 10$ and $\eta = 0.01$, which leads to a large surface roughness, since it corresponds to a low-temperature (low-mobility) regime. Reference [29] derived the coefficients of a Langevin equation, with VLDS form, as a function of D and $1 - \eta$.

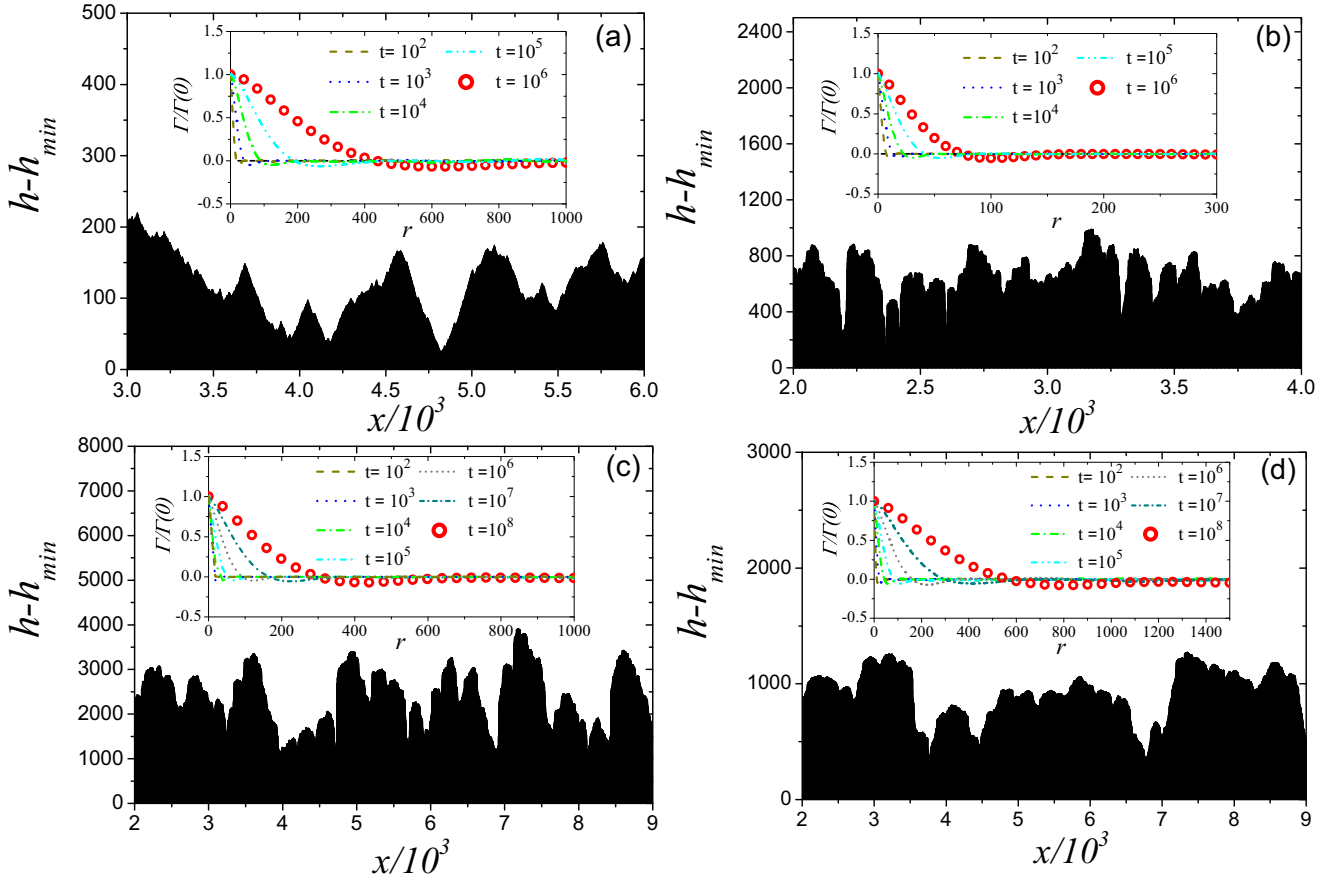


FIG. 1. Profiles for (a) CRSOS, (b) CV, and [(c) and (d)] DT models at $t = 10^6$ (CRSOS and CV) and $t = 10^8$ (DT). The simulations were performed on systems of size $L = 2^{14}$, assuring that the dynamics is not in the stationary regime of roughness saturation for the analyzed times. Insets show the corresponding normalized correlation function at different times, averaged over 10^3 independent realizations. Analysis for the DT model using noise reduction with $M = 4$ is shown in (d).

In the one-dimensional DT model [7], the arriving particle sticks at the top of the incidence site if there is one or two lateral bonds. Otherwise, if one of the nearest-neighbors satisfies this condition, it is chosen for the deposition, whereas if both do, then one of them is randomly chosen. If neither the deposition site nor any of the nearest-neighbors have lateral bonds, then the particle sticks at the top of the incidence site. We also applied the noise-reduction technique [35], in which a site must be selected M times before implementing a deposition. We considered the case of mild noise reduction $M = 4$ where the interface roughness remains large.

A characteristic lateral surface length can be estimated as the first zero (ξ_0) of the height-height correlation function defined as [3,38,39]

$$\Gamma(s, t) \equiv \langle \tilde{h}(s_0 + s, t) \tilde{h}(s_0, t) \rangle, \quad (3)$$

where $\tilde{h} \equiv h - \bar{h}$ and the averages are taken over different initial positions s_0 and different configurations. The correlation length ξ_0 is defined as the position of the first zero of the correlation function, i.e., $\Gamma(\xi_0, t) = 0$ and are expected to scale as $\xi_0(t) \sim t^{1/z_c}$, where z_c is the coarsening exponent that usually corresponds to the dynamical exponent defined previously.

Figure 1 shows profiles for CRSOS, CV, and DT models for times $t = 10^6$ (CRSOS and CV) and $t = 10^8$ (DT). One can see the presence of a characteristic length (mounded structures) for the CV and DT cases and a self-affine structure with less-evident mounds for the CRSOS model. As illustrated by the corresponding insets in Fig. 1, the estimated characteristic lengths ξ_0 for CRSOS and CV correspond to $\xi_0 \approx 433$ and $\xi_0 \approx 74$, respectively. For DT, the estimated values without and with noise reduction are $\xi_0 \approx 299$ and $\xi_0 = 564$, respectively. Here it is possible to note a decrease of the global roughness as M increases suppressing large hills and valleys in the surfaces. Concomitantly, an increase of the characteristic mound sizes is observed, which is reflected by an increasing of the correlation length.

III. OPTIMAL DETRENDED FLUCTUATION METHOD

Let us start with the standard DFA method using an n th-order polynomial to detrend the surface [40], hereafter called DFA_n . The interface fluctuation within a window i of size r in DFA_n is defined as

$$\omega_i^{(n)} = \langle (\delta^{(n)})^2 \rangle_i^{1/2}, \quad (4)$$

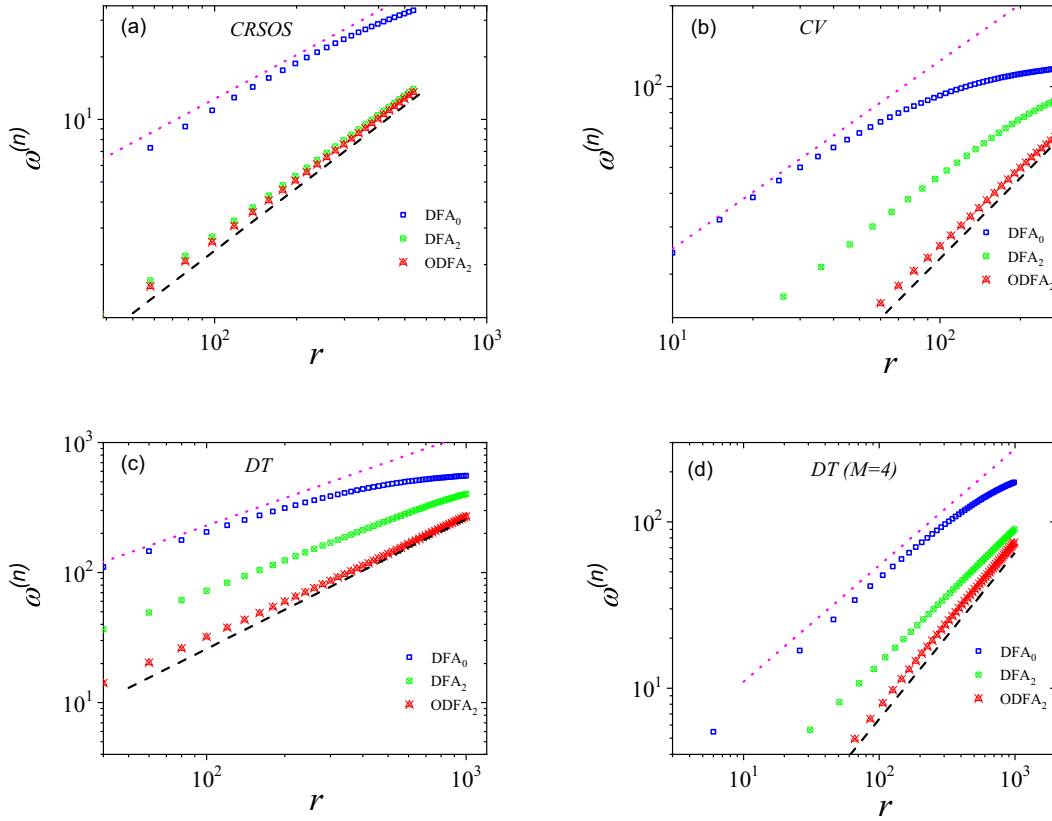


FIG. 2. Local roughness as a function of the window size using different methods for (a) the CRSOS model at $t = 10^6$, (b) the CV model at $t = 10^6$, and (c) the DT model at $t = 10^8$. The dotted and dashed lines have slopes 0.7 and 1, respectively. Averages were performed over up to 10^3 independent realizations. The system size is $L = 2^{14}$. (d) The same analysis for the DT model using noise reduction with $M = 4$ [35].

where

$$\delta^{(n)} = h(x) - G_i[x; A_i^{(0)}, A_i^{(1)}, \dots, A_i^{(n)}], \quad (5)$$

G_i is an n th-order polynomial regression of the interface within the i th window with coefficients $A_i^{(0)}, A_i^{(1)}, \dots, A_i^{(n)}$ obtained using least-squares method [41]. The local roughness yielded by the DFA_n method $\omega^{(n)}$ is given by the average over different windows and samples. In the standard local roughness analysis, which corresponds to DFA_0 , the surfaces fluctuations are computed in relation to the average height such that $G_i = A_i^{(0)} = \langle h \rangle_i$.

In the ODFA method, the local roughness in the window i of size r is defined by Eq. (4) with

$$\delta^{(n)} = \min_x [h(x) - G_i(x; A_i^{(0)}, A_i^{(1)}, \dots, A_i^{(n)})], \quad (6)$$

where \min_x represents minimal distance from the surface point with height $h(x)$ to the polynomial G_i .

Differences between the exponents yielded by the DFA and ODFA methods were reported [37] in the kinetic roughening obtained for the deposition on initially mounded substrates. The second-order ODFA₂ method allows us to capture the expected universality class of the fluctuations at scales shorter than the average mound length, whereas DFA₂ underestimates the exponents [37]. In both cases, the main advantage of the second-order methods with respect to the first-order ones are more extended regions of scaling, represented by longer

plateaus in the effective roughness exponent,

$$\alpha_{\text{eff}} \equiv \frac{d[\ln \omega^{(n)}]}{d[\ln r]}, \quad (7)$$

as function of the scale r .

IV. SCALING OF THE LOCAL SURFACE ROUGHNESS

Figure 2 shows the local roughness $\omega^{(n)}$ as a function of the window size r for the CRSOS, CV, and DT models. The analyses using DFA_0 indicate a local slope close to 0.7 at small scales ($r \lesssim 10^2$) for all cases corroborating previous reports for models in the VLDS universality class [30,31]. However, the slopes are close to $\alpha_{\text{loc}} = 1$, predicted by the one-loop RG approach [18], when we consider the scaling obtained from ODFA₂.

In the case of the CRSOS model, the DFA_2 and $ODFA_2$ methods provide very similar curves, confirmed in the local roughness exponent analysis of Figs. 2(a) and Fig. 3(a). This can be justified by the self-affine (fractal) geometry exhibited by the profile, as observed in Fig. 1(a), which implies negligible differences between the height fluctuations determined either by Eq. (5) or Eq. (6). This fact is illustrated in Fig. 4(a), in which a zoomed part of a CRSOS profile is shown with the respective differences $\delta_{\text{DFA}}^{(2)}$ and $\delta_{\text{ODFA}}^{(2)}$ for some selected points. We also verified that the corresponding scaling of the second-order methods are improved (the plateau region of the

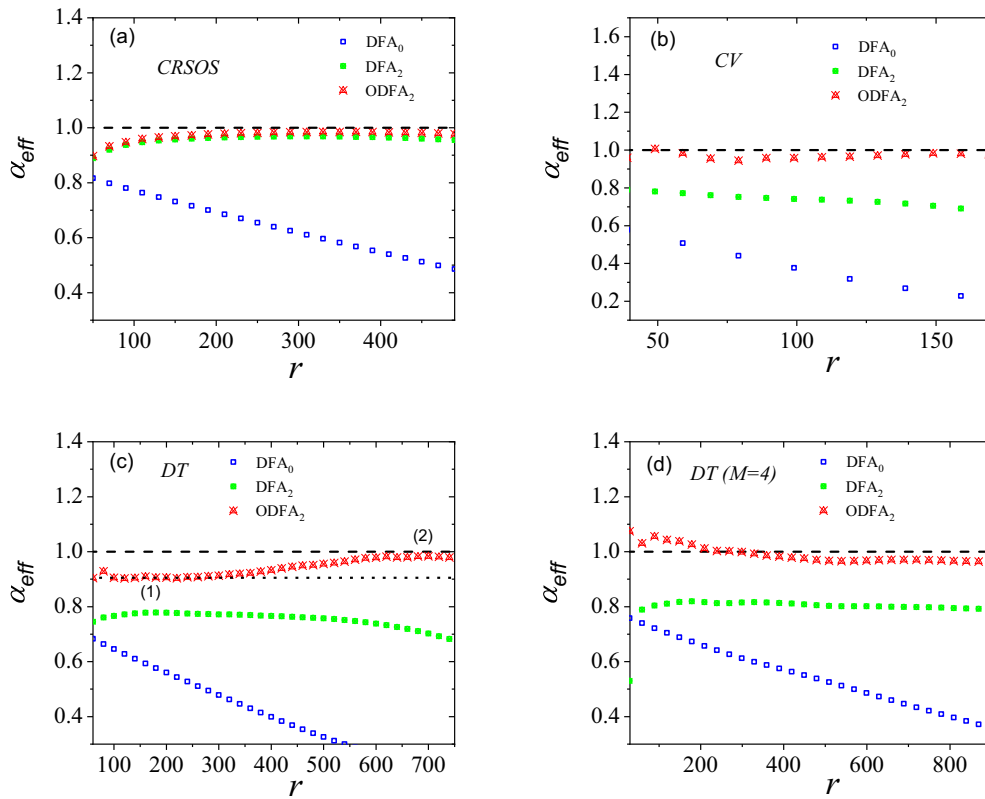


FIG. 3. Effective local roughness exponent analysis with different methods for (a) the CRSOS model at $t = 10^6$, (b) the CV model at $t = 10^6$, and (c) the DT model at $t = 10^8$. Two scaling regions are observed in the DT model at shorter and larger scales indicated by (1) and (2). The horizontal dashed lines indicate the value of the nMBE roughness exponent predicted by one-loop RG in $d = 1$ and the dotted line in (c) indicates the value 0.90. (d) The same analysis for the DT model using noise reduction with $M = 4$ [35].

effective exponent analysis is larger) if compared with their first-order counterpart, but the exponent values are approximately the same (results not shown). We determined the local roughness exponent of the CRSOS model in the plateau $260 \lesssim r \lesssim 460$ shown in Fig. 3(a) and found $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{CRSOS})} = 0.983(1)$, which is consistent with the claim of corrections in the one-loop RG analysis such that $\alpha_{\text{loc}} = 1 - \epsilon$ [18]. Our result suggests that the corrections in the one-loop RG exponent are consistent with that reported in two-loop RG calculations [18], improving reports previously indicated elsewhere [19] for low dimensions. We stress that our result for α_{loc} obtained for the CRSOS model, in which weak corrections to the scaling are expected, is slightly above (4% of deviation) to the global roughness exponent $\alpha = 0.94(2)$ reported in Ref. [19], corroborating that the asymptotic anomalous scaling does not occur for this model.

Differences between the ODFA₂ and DFA₂ methods are more evident for the CV model as can be seen in Figs. 2(b) and 3(b). Again, the plateau is larger considering ODFA₂ as compared with ODFA₁ (data not shown). However, for ODFA₁, we obtained an effective roughness exponent $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{CV})} \approx 1.14(4)$ slightly larger than unity at small scales, a spurious value that can be explained as a consequence of the large local slope in approximately columnar parts of the profile, as shown in Fig. 1(b). Indeed, the linear regression does not fit well the corresponding structures at small scales while the quadratic one does. Using the range $50 \lesssim r \lesssim 170$, which corresponds

to the plateau shown in Fig. 3(b), the exponent obtained with ODFA₂ is $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{CV})} = 0.96(1)$, in consonance with the normal scaling of the CV model observed in two dimensions [11,37].

Figure 2(c) shows the local interface roughness for the DT model without noise reduction, in which noticeable differences can be seen in the ODFA₂ and DFA₂ methods. One can see in Fig. 4(b) that the differences between the distances to the detrending curve using the ODFA and DFA methods can be very large. A crossover between two scaling regimes is observed. For scales smaller than the characteristic length ($0.23 \lesssim r/\xi_0 \lesssim 0.90$), a plateau is observed for the ODFA₂ case, where the local roughness exponent was estimated as $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{DT})} = 0.903(1)$, consistent with those found in the case of high noise reduction $M \geq 64$ [35]. At larger scales ($2.00 \lesssim r/\xi_0 \lesssim 2.51$), $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{DT})} = 0.976(1)$ was observed. To the best of our knowledge, the ODFA₂ method for the DT model yields the first evidence, without noise-reduction techniques [34–36], of a roughness exponent consistent with the nMBE class [see Fig. 3(c)]. Even though noise reduction should not change the universality class [42], very high levels reduce a lot the interface roughness, which becomes smoothed with a trending to provide an exponent close to 1. So we have also analyzed the DT model with a mild noise reduction ($M = 4$). The interface roughness is reduced with respect to the original model but is still quite large, as can be seen in Fig. 4(c). The local roughness analyses are shown in Figs. 2(d) and 3(d). With ODFA₂ we observed $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{DT})} = 0.967(2)$, which is much

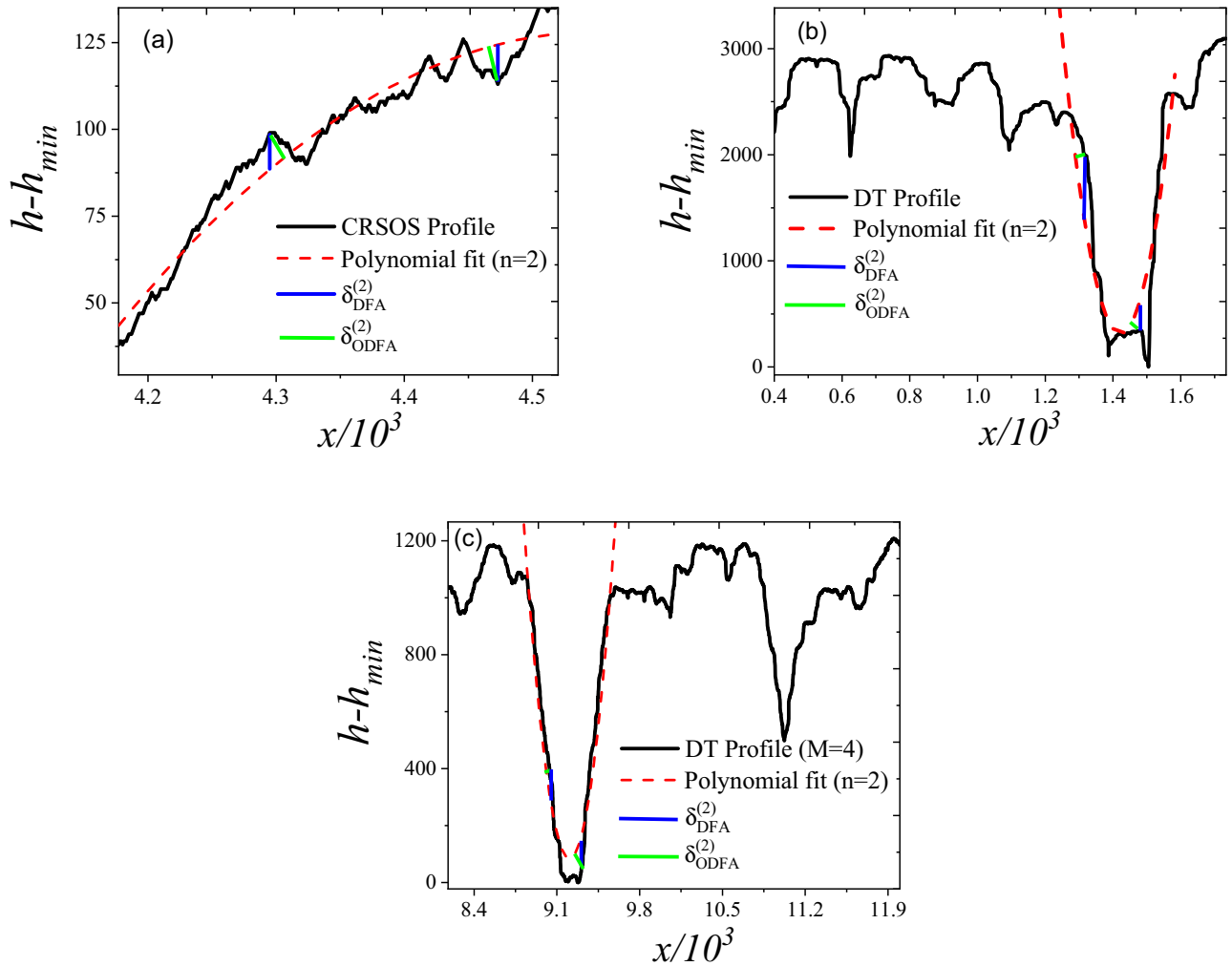


FIG. 4. Sections of the profiles shown with the second-order polynomial regressions (dashed lines) for the (a) CRSOS and [(b) and (c)] DT models. The DT model is analyzed (b) without and (c) with noise reduction using $M = 4$. Selected points of the profile illustrates the differences between the $\delta^{(2)}$ calculated with DFA and ODFA methods.

closer to the VLDS class than the value $\alpha_{loc}^{(DT)} = 0.804(7)$ obtained with DFA_2 . The latter is in good agreement with the α_{loc} exponent reported in Ref. [35] for a similar noise-reduction parameter. This result could lead to a misinterpretation supporting anomalous scaling in the DT model, since a large global roughness exponent $\alpha \approx 1.2$ was also reported in Ref. [35] for this same range of M . Our results with $ODFA_2$ strongly suggest the absence of the anomalous scaling for the DT model, too.

V. CONCLUSIONS

The scaling properties of one-dimensional interfaces obtained with simulations of lattice models belonging to nMBE universality class is an issue that has attracted considerable attention [12,13,31,35–38], given the outstanding importance of diffusion for applications in thin film growth [3,4]. Differently from the Kardar-Parisi-Zhang [43] universality class that has plenty of lattices models described by its scaling exponents [1,2], the nMBE class, where diffusion is the ruling mechanism on the surface growth, has only a few

basic prototypes. Three basic examples are the CRSOS [5,6], CV [8,9], and DT [7] models, which are investigated in the present work. To date, only the first one has been supported with irrefutable evidence that it belongs to the nMBE class. In the present work, we provide numerical analysis of the local roughness (Hurst) exponent [1,40] of interfaces generated with these models, using the recently proposed optimal detrended fluctuation analysis [37], which is devised to investigate universality class in mounded structures. As in the two-dimensional analysis of mounded surfaces, the ODFA method [37] outperforms the standard DFA in the determination of the local roughness exponent α_{loc} , as can be seen in Table I, where a summary of the results reported in this paper is presented. For all investigated models, the roughness exponents were found within the interval [0.96,0.98], in quantitative agreement with the two-loop correction $\alpha = 1 - \epsilon$ with $\epsilon = 0.0306$ in one dimension. This rules out the existence of asymptotic anomalous roughening sometimes claimed for these models [22] since these values are consistent with the predictions of the two-loop renormalization group developed by Janssen [18], where corrections in one-loop

TABLE I. Values of the local roughness exponent calculated using the ODFA₂ and DFA₂ methods in the corresponding range of the ratio r/ξ_0 (see also Fig. 3 for plateaus in the effective exponent analysis). The symbol * means the absence of reliable scaling regimes in the corresponding range of r/ξ_0 .

Model	r/ξ_0	ODFA ₂	DFA ₂
CRSOS	[0.6, 1.06]	0.983(1)	0.966(2)
CV	[0.67, 2.3]	0.96(1)	0.73(3)
DT [Region (1)]	[0.23, 0.90]	0.903(1)	0.772(6)
DT [Region (2)]	[2.00, 2.51]	0.976(1)	*
DT [$M = 4$]	[0.88, 1.58]	0.967(2)	0.804(7)

calculations of the form $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{VLDS})} = 1 - \epsilon$ are expected in all dimensions. To the best of our knowledge, this is the first evidence for the local roughness exponent measured in the DT model that agrees with the nMBE class. The original DT model still possesses a small ambiguity in the value of α_{loc} : At short scales, the value $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{DT})} = 0.903$ is close to the VLDS exponent $\alpha_{\text{loc}}^{(\text{VLDS})} = 1 - \epsilon$, albeit still not negligibly below the VLDS value observed for intermediary scales, as shown in Table I. However, a mild noise reduction is sufficient to remove very strong corrections to the scaling and an accordance with the nMBE exponent is also found. Our results also support the

theoretical analyses by Haselwandter and Vvedensky [27–29] that explained the apparent anomalous scaling based on a multiscale analysis of atomistic surface processes.

Our findings constitute an important step for confirming the nMBE as a general universality class. Moreover, the scarcity of experimental evidences for nMBE could be explained by the almost unavoidable presence of strong corrections to the scaling due to limitations for growth times and resolution in scanning probe microscopes [44,45], which might be addressed using suitable methods such as ODFA [37]. This method can be easily extended to the analysis of self-affine objects not related to surface growth such as time series modulated for seasonal changes [46]. Further enhancement of this method may include adapting it for global detrending, which will allow the characterization of other features in interface growth such as properties of the underlying fluctuations in height distributions [47–49].

ACKNOWLEDGMENTS

T.A.d.A., S.C.F., and R.F.S.A. thank the financial support of Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). S.C.F. acknowledges the support of Fundação de Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG). This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, Brasil (CAPES), Finance Code 001.

- [1] A.-L. Barabasi and H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [2] J. Krug, Origins of scale invariance in growth processes, *Adv. Phys.* **46**, 139 (1997).
- [3] J. Evans, P. Thiel, and M. Bartelt, Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds, *Surf. Sci. Rep.* **61**, 1 (2006).
- [4] M. Ohring, *Materials Science of Thin Films*, 2nd ed. (Academic Press, San Diego, CA, 2002).
- [5] Y. Kim, D. K. Park, and J. M. Kim, Conserved growth in a restricted solid-on-solid model, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, L533 (1994).
- [6] Y. Kim and J.-M. Kim, Surface morphology, hopping, and current in a conserved growth model with a restricted solid-on-solid condition, *Phys. Rev. E* **55**, 3977 (1997).
- [7] S. Das Sarma and P. Tamborenea, A New Universality Class for Kinetic Growth: One-Dimensional Molecular-Beam Epitaxy, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 325 (1991).
- [8] S. Clarke and D. D. Vvedensky, Origin of Reflection High-Energy Electron-Diffraction Intensity Oscillations During Molecular-Beam Epitaxy: A Computational Modeling Approach, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2235 (1987).
- [9] S. Clarke and D. D. Vvedensky, Growth kinetics and step density in reflection high-energy electron diffraction during molecular-beam epitaxy, *J. Appl. Phys.* **63**, 2272 (1988).
- [10] M. Kotrla and P. Šmilauer, Nonuniversality in models of epitaxial growth, *Phys. Rev. B* **53**, 13777 (1996).
- [11] T. A. de Assis and F. D. A. Aarão Reis, Dynamic scaling and temperature effects in thin film roughening, *J. Stat. Mech. Theory Exp.* (2015) P06023.
- [12] T. B. To, V. B. de Sousa, and F. D. Aarão Reis, Thin film growth models with long surface diffusion lengths, *Physica A: Stat. Mech. Appl.* **511**, 240 (2018).
- [13] S.-C. Park, D. Kim, and J.-M. Park, Derivation of continuum stochastic equations for discrete growth models, *Phys. Rev. E* **65**, 015102 (2001).
- [14] M. Předota and M. Kotrla, Stochastic equations for simple discrete models of epitaxial growth, *Phys. Rev. E* **54**, 3933 (1996).
- [15] J. Villain, Continuum models of crystal growth from atomic beams with and without desorption, *J. Phys. I France* **1**, 19 (1991).
- [16] Z.-W. Lai and S. Das Sarma, Kinetic Growth with Surface Relaxation: Continuum Versus Atomistic Models, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2348 (1991).
- [17] F. Family and T. Vicsek, Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model, *J. Phys. A: Math. Gen.* **18**, L75 (1985).
- [18] H. K. Janssen, On Critical Exponents and the Renormalization of the Doupling Constant in Growth Models with Surface Diffusion, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1082 (1997).
- [19] F. D. A. Aarão Reis, Numerical study of discrete models in the class of the nonlinear molecular beam epitaxy equation, *Phys. Rev. E* **70**, 031607 (2004).
- [20] J. M. López, M. Castro, and R. Gallego, Scaling of Local Slopes, Conservation Laws, and Anomalous Roughening in Surface Growth, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 166103 (2005).
- [21] J. M. López, Scaling Approach to Calculate Critical Exponents in Anomalous Surface Roughening, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4594 (1999).

- [22] H. Xia, G. Tang, Z. Xun, and D. Hao, Numerical evidence for anomalous dynamic scaling in conserved surface growth, *Surf. Sci.* **607**, 138 (2013).
- [23] F. D. A. Aarão Reis, Normal dynamic scaling in the class of the nonlinear molecular-beam-epitaxy equation, *Phys. Rev. E* **88**, 022128 (2013).
- [24] S. Yim and T. S. Jones, Anomalous scaling behavior and surface roughening in molecular thin-film deposition, *Phys. Rev. B* **73**, 161305 (2006).
- [25] F. S. Nascimento, S. C. Ferreira, and S. O. Ferreira, Faceted anomalous scaling in the epitaxial growth of semiconductor films, *Europhys. Lett.* **94**, 68002 (2011).
- [26] A. S. Mata, S. C. Ferreira, I. R. B. Ribeiro, and S. O. Ferreira, Anomalous scaling and super-roughness in the growth of cdc polycrystalline films, *Phys. Rev. B* **78**, 115305 (2008).
- [27] C. A. Haselwandter and D. D. Vvedensky, Multiscale theory of Fluctuating Interfaces: Renormalization of Atomistic Models, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 046102 (2007).
- [28] C. A. Haselwandter and D. D. Vvedensky, Renormalization of stochastic lattice models: Basic formulation, *Phys. Rev. E* **76**, 041115 (2007).
- [29] C. A. Haselwandter and D. D. Vvedensky, Renormalization of stochastic lattice models: Epitaxial surfaces, *Phys. Rev. E* **77**, 061129 (2008).
- [30] J. Krug, Turbulent Interfaces, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2907 (1994).
- [31] A. Chame and F. Aarão Reis, Scaling of local interface width of statistical growth models, *Surf. Sci.* **553**, 145 (2004).
- [32] C. Dasgupta, S. Das Sarma, and J. M. Kim, Controlled instability and multiscaling in models of epitaxial growth, *Phys. Rev. E* **54**, R4552 (1996).
- [33] S. Das Sarma, C. J. Lanczycki, R. Kotlyar, and S. V. Ghaisas, Scale invariance and dynamical correlations in growth models of molecular beam epitaxy, *Phys. Rev. E* **53**, 359 (1996).
- [34] P. Punyindu and S. Das Sarma, Noise reduction and universality in limited-mobility models of nonequilibrium growth, *Phys. Rev. E* **57**, R4863 (1998).
- [35] Z.-p. Xun, Z. Zhang, L. Wu, H. Xia, D.-p. Hao, Y. Yang, Y.-L. Chen, and G. Tang, Large-scale numerical study on the dynamic scaling behavior of Das Sarma-Tamborenea model by employing noise reduction technique, *Europhys. Lett.* **111**, 60012 (2015).
- [36] P. Disrattakit, R. Chanphana, and P. Chatraphorn, Roughness distribution of multiple hit and long surface diffusion length noise reduced discrete growth models, *Physica A: Stat. Mech. Appl.* **462**, 619 (2016).
- [37] E. E. Mozo Luis, T. A. de Assis, and S. C. Ferreira, Optimal detrended fluctuation analysis as a tool for the determination of the roughness exponent of the mounded surfaces, *Phys. Rev. E* **95**, 042801 (2017).
- [38] F. F. Leal, S. C. Ferreira, and S. O. Ferreira, Modelling of epitaxial film growth with an Ehrlich-Schwoebel barrier dependent on the step height, *J. Phys. Condens. Matter* **23**, 292201 (2011).
- [39] F. F. Leal, T. J. Oliveira, and S. C. Ferreira, Kinetic modeling of epitaxial film growth with up- and downward step barriers, *J. Stat. Mech. Theory Exp.* (2011) P09018.
- [40] C.-K. Peng, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. Simons, H. E. Stanley, and A. L. Goldberger, Mosaic organization of DNA nucleotides, *Phys. Rev. E* **49**, 1685 (1994).
- [41] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, 3rd ed. (Cambridge University Press, New York, NY, 2007).
- [42] J. Kertesz and D. E. Wolf, Noise reduction in Eden models: II. Surface structure and intrinsic width, *J. Phys. A: Math. Gen.* **21**, 747 (1988).
- [43] M. Kardar, G. Parisi, and Y.-C. Zhang, Dynamic Xcaling of Growing Interfaces, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
- [44] F. Lechenault, G. Pallares, M. George, C. Rountree, E. Bouchaud, and M. Ciccotti, Effects of Finite Probe Size on Self-Affine Roughness Measurements, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 025502 (2010).
- [45] S. G. Alves, C. I. L. D. Araujo, and S. C. Ferreira, Hallmarks of the Kardar-Parisi-Zhang universality class elicited by scanning probe microscopy, *New J. Phys.* **18**, 093018 (2016).
- [46] R. Vassoler and G. Zebende, DCCA cross-correlation coefficient apply in time series of air temperature and air relative humidity, *Phys. A Stat. Mech. its Appl.* **391**, 2438 (2012).
- [47] S. G. Alves, T. J. Oliveira, and S. C. Ferreira, Universality of fluctuations in the Kardar-Parisi-Zhang class in high dimensions and its upper critical dimension, *Phys. Rev. E* **90**, 020103 (2014).
- [48] I. S. S. Carrasco and T. J. Oliveira, Universality and dependence on initial conditions in the class of the nonlinear molecular beam epitaxy equation, *Phys. Rev. E* **94**, 050801 (2016).
- [49] T. A. de Assis, C. P. de Castro, F. de Brito Mota, C. M. C. de Castilho, and R. F. S. Andrade, Distribution of scaled height in one-dimensional competitive growth profiles, *Phys. Rev. E* **86**, 051607 (2012).

Referências Bibliográficas

- [1] Aaron David Craig. *Flexible Memory Allocation in Kinetic Monte Carlo Simulations*. (Master's Thesis, University of Tennessee, 2015).
- [2] Milton Ohring. *Materials Science of Thin Films*. (Academic Press, 2 edition, 2001).
- [3] John A. Venables. *Introduction to Surface and Thin Film Processes*. (Cambridge University, 1 edition, 2000).
- [4] Riku Isoaho, Arto Aho, Antti Tukiainen, Timo Aho, Marianna Raappana, Turkka Salminen, Jarno Reuna, and Mircea Guina. Photovoltaic properties of low-bandgap (0.7–0.9eV) lattice-matched GaInNAs solar junctions grown by molecular beam epitaxy on GaAs. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **195**:198, (2019).
- [5] Q. Durlin, J.P. Perez, L. Cerutti, J.B. Rodriguez, T. Cerba, T. Baron, E. Tournié, and P. Christol. Midwave infrared barrier detector based on Ga-free InAs/InAsSb type-II superlattice grown by molecular beam epitaxy on Si substrate. *Infrared Physics & Technology*, **96**:39, (2019).
- [6] S. Zhao, R. Wang, S. Chu, and Z. Mi. Molecular beam epitaxy of InN nanowires: Emerging applications from deep-ultraviolet light emitters and micro-LEDs to artificial photosynthesis. *IEEE Nanotechnology Magazine*, **13**:6, (2019).
- [7] A. A. Andreev, Yu. V. Grishchenko, I. S. Ezubchenko, M. Ya. Chernykh, E. M. Kolobkova, I. O. Maiboroda, I. A. Chernykh, and M. L. Zhanavskina. Studying the characteristics of transistors based on gallium nitride heterostructures grown by ammonia molecular beam epitaxy on sapphire and silicon substrates. *Technical Physics Letters*, **45**:173, (2019).
- [8] C. Chevuntulak, T. Rakpaisee, N. Sridumrongsak, S. Thainoi, S. Kiravittaya, N. Nuntawong, S. Sopitpan, V. Yordsri, C. Thanachayanont, S. Kanjanachuchai, S. Ratanathamphan, A. Tandaechanurat, and S. Panyakeow. Molecular beam epitaxial growth of interdigitated quantum dots for heterojunction solar cells. *Journal of Crystal Growth*, **512**:159, (2019).
- [9] S. O. Ferreira, I. R. B. Ribeiro, J. Suela, I. L. Menezes-Sobrinho, S. C. Ferreira, and S. G. Alves. Effect of temperature on the Hurst and growth exponents of CdTe polycrystalline films. *Applied Physics Letters*, **88**:244102, (2006).
- [10] J. Zhang, X.Y. Chen, Y.J. Ma, Q. Gong, Y.H. Shi, N.N. Yang, H. Huang, G.X. He, Y. Gu, and Y.G. Zhang. Optimization of In_{0.6}Ga_{0.4}As/InAs electron barrier

- for In_{0.74}Ga_{0.26}As detectors grown by molecular beam epitaxy. *Journal of Crystal Growth*, **512**:84, (2019).
- [11] Ahmed Alyamani, Evgenii V. Lutsenko, Mikalai V. Rzheutski, Vitaly Z. Zubialevich, Aliaksei G. Vainilovich, Illia E. Svitsiankou, Varvara A. Shulenkova, Gennadii P. Yablonskii, Stanislav I. Petrov, and Alexey N. Alexeev. AlGa_N/Ga_N high electron mobility transistor heterostructures grown by ammonia and combined plasma-assisted ammonia molecular beam epitaxy. *Japanese Journal of Applied Physics*, **58**:SC1010, (2019).
- [12] Nripendra N Halder, Alexander Kelrich, Shimon Cohen, and Dan Ritter. Controlled axial and radial growth of InP nanowires by metal–organic molecular beam epitaxy using the selective-area vapor–liquid–solid approach. *Nanotechnology*, **29**:415602, (2018).
- [13] J.W. Evans, P.A. Thiel, and M.C. Bartelt. Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2d islands and 3d mounds. *Surface Science Reports*, **61**:1, (2006).
- [14] Joachim Krug Thomas Michely. *Islands, Mounds and Atoms*. Springer Series in Surface Sciences. (Springer, Berlin, 2012).
- [15] G. Binnig, C. F. Quate, and Ch. Gerber. Atomic force microscope. *Phys. Rev. Lett.*, **56**:930, (1986).
- [16] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel. Tunneling through a controllable vacuum gap. *Applied Physics Letters*, **40**:178, (1982).
- [17] F. Lechenault, G. Pallares, M. George, C. Rountree, E. Bouchaud, and M. Ciccotti. Effects of finite probe size on self-affine roughness measurements. *Phys. Rev. Lett.*, **104**:025502, (2010).
- [18] Sidiney G Alves, Clodoaldo I L de Araujo, and Silvio C Ferreira. Hallmarks of the kardar-parisi-zhang universality class elicited by scanning probe microscopy. *IOP Publishing*, **18**:093018, (2016).
- [19] Tobias Henksmeier, Stepan Shvarkov, Alexander Trapp, and Dirk Reuter. Molecular beam epitaxy growth and temperature-dependent electrical characterization of carbon-doped gaas on gaas(1 1 1)b. *Journal of Crystal Growth*, **512**:164, (2019).
- [20] Kun Song, Xuanting Zhu, Kai Tang, W. Bai, Liangqing Zhu, Jing Yang, Yuanyuan Zhang, Xiaodong Tang, and Junhao Chu. Molecular beam epitaxial growth, transmittance and photoluminescence spectra of zinc-blende cdte thin films with high-quality on perovskite SrTiO₃(111) substrates. *Journal of Crystal Growth*, **485**:41, (2018).
- [21] R. A. L. Almeida, S. O. Ferreira, I. R. B. Ribeiro, and T. J. Oliveira. Temperature effect on (2+1) experimental kardar-parisi-zhang growth. *EPL (Europhysics Letters)*, 109(4):46003, feb 2015.

- [22] Isnard Ferraz Renan A. L. Almeida, Sukarno O. Ferreira and Tiago J. Oliveira. Initial pseudo-steady state asymptotic KPZ universality in semiconductor on polymer deposition. *Scientific Reports*, **7**:3773, (2017).
- [23] Miguel A. Gosálvez and Joseba Alberdi-Rodriguez. Microscopic origin of the apparent activation energy in diffusion-mediated monolayer growth of two-dimensional materials. *The Journal of Physical Chemistry C*, **121**:20315, (2017).
- [24] Iwan Zimmermann, Sadig Aghazada, and Mohammad Khaja Nazeeruddin. Lead and htm free stable two-dimensional tin perovskites with suitable band gap for solar cell applications. *Angewandte Chemie International Edition*, **58**:1072, (2019).
- [25] Kowsik Sambath Kumar, Nitin Choudhary, Yeonwoong Jung, and Jayan Thomas. Recent advances in two-dimensional nanomaterials for supercapacitor electrode applications. *ACS Energy Letters*, **3**:482, (2018).
- [26] Saoirse Dervin, Dionysios D. Dionysiou, and Suresh C. Pillai. 2d nanostructures for water purification: graphene and beyond. *Nanoscale*, **8**:15115, (2016).
- [27] Javier Méndez, M. Francisca López, and José A. Martín-Gago. On-surface synthesis of cyclic organic molecules. *Chem. Soc. Rev.*, **40**:4578, (2011).
- [28] Hugh O Pierson. *Handbook of chemical vapor deposition [i.e. deposition] (CVD) : principles, technology, and applications*. Materials science and process technology series. 2nd ed. (Noyes Publications-William Andrew Pub, 1999).
- [29] Mehran Kardar, Giorgio Parisi, and Yi-Cheng Zhang. Dynamic scaling of growing interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, **56**:889, (1986).
- [30] S. F. Edwards and D. R. Wilkinson. The surface statistics of a granular aggregate. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, **381**(1780):17, (1982).
- [31] J. Villain. Continuum models of crystal growth from atomic beams with and without desorption. *J. Phys. I France*, **1**, (1991).
- [32] Z.-W. Lai and S. Das Sarma. Kinetic growth with surface relaxation: Continuum versus atomistic models. *Phys. Rev. Lett.*, **66**:2348, (1991).
- [33] W. W. Mullins. Theory of thermal grooving. *Journal of Applied Physics*, **28**(3):333, (1957).
- [34] Conyers Herring. Effect of change of scale on sintering phenomena. *Journal of Applied Physics*, **21**:301, (1950).
- [35] Harry Eugene Stanley Albert-Laszlo Barabasi. *Fractal concepts in surface growth*. (Cambridge University Press, 1 edition, 1995).
- [36] Paul Meakin. *Fractals, Scaling and Growth Far From Equilibrium*. Cambridge Nonlinear Science Series. (Cambridge University Press 1998).

- [37] F F Leal, S C Ferreira, and S O Ferreira. Modelling of epitaxial film growth with an Ehrlich–Schwoebel barrier dependent on the step height. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **23**:292201, (2011).
- [38] F F Leal, T J Oliveira, and S C Ferreira. Kinetic modelling of epitaxial film growth with up- and downward step barriers. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2011**:P09018, (2011).
- [39] T A de Assis and F D A Aarão Reis. Thin film deposition with time-varying temperature. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2013**:P10008, (2013).
- [40] Tung B.T. To, Vitor B. de Sousa, and Fábio D.A. Aarão Reis. Thin film growth models with long surface diffusion lengths. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **511**:240, (2018).
- [41] Anderson J. Pereira, Sidiney G. Alves, and Silvio C. Ferreira. Effects of a kinetic barrier on limited-mobility interface growth models. *Phys. Rev. E*, **99**:042802, Apr (2019).
- [42] P. I. Tamborenea and S. Das Sarma. Surface-diffusion-driven kinetic growth on one-dimensional substrates. *Phys. Rev. E*, **48**:2575, (1993).
- [43] S. Das Sarma, C. J. Lanczycki, R. Kotlyar, and S. V. Ghaisas. Scale invariance and dynamical correlations in growth models of molecular beam epitaxy. *Phys. Rev. E*, **53**:359, (1996).
- [44] Miroslav Kotrla and Pavel Šmilauer. Nonuniversality in models of epitaxial growth. *Phys. Rev. B*, **53**:13777, (1996).
- [45] B. Meng and W.H. Weinberg. Dynamical monte carlo studies of molecular beam epitaxial growth models: interfacial scaling and morphology. *Surface Science*, **364**:151, (1996).
- [46] S. Das Sarma, C. J. Lanczycki, R. Kotlyar, and S. V. Ghaisas. Scale invariance and dynamical correlations in growth models of molecular beam epitaxy. *Phys. Rev. E*, **53**:359.
- [47] C. A Haselwandter and D. D Vvedensky. Fluctuation regimes of driven epitaxial surfaces. *Europhysics Letters (EPL)*, **77**:38004, (2007).
- [48] Christoph A. Haselwanter and Dimitri D. Vvedensky. Renormalization of atomistic growth models. *International Journal of Modern Physics B*, **22**:3721, (2008).
- [49] Tapas Singha and Malay K Nandy. A renormalization scheme and skewness of height fluctuations in (1+1)-dimensional vlds dynamics. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2016**:023205, (2016).
- [50] S. Das Sarma and P. Tamborenea. A new universality class for kinetic growth: One-dimensional molecular-beam epitaxy. *Phys. Rev. Lett.*, **66**:325, (1991).

- [51] Yup Kim, D K Park, and Jin Min Kim. Conserved growth in a restricted solid-on-solid model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **27**:L533, (1994).
- [52] Yup Kim and Jin-Min Kim. Surface morphology, hopping, and current in a conserved growth model with a restricted solid-on-solid condition. *Phys. Rev. E*, **55**:3977, (1997).
- [53] F. D. A. Aarão Reis. Numerical study of discrete models in the class of the nonlinear molecular beam epitaxy equation. *Phys. Rev. E*, **70**:031607, (2004).
- [54] Juan M. López. Scaling approach to calculate critical exponents in anomalous surface roughening. *Phys. Rev. Lett.*, **83**:4594, (1999).
- [55] Juan M. López, Mario Castro, and Rafael Gallego. Scaling of local slopes, conservation laws, and anomalous roughening in surface growth. *Phys. Rev. Lett.*, **94**:166103, (2005).
- [56] F. D. A. Aarão Reis. Normal dynamic scaling in the class of the nonlinear molecular-beam-epitaxy equation. *Phys. Rev. E*, **88**:022128, (2013).
- [57] S. Yim and T. S. Jones. Anomalous scaling behavior and surface roughening in molecular thin-film deposition. *Phys. Rev. B*, **73**:161305, (2006).
- [58] Angélica S. Mata, Silvio C. Ferreira, Igor R. B. Ribeiro, and Sukarno O. Ferreira. Anomalous scaling and super-roughness in the growth of cdtc polycrystalline films. *Phys. Rev. B*, **78**:115305, (2008).
- [59] F. S. Nascimento, S. C. Ferreira, and S. O. Ferreira. Faceted anomalous scaling in the epitaxial growth of semiconductor films. *EPL (Europhysics Letters)*, **94**:68002, (2011).
- [60] Hui Xia, Gang Tang, Zhipeng Xun, and Dapeng Hao. Numerical evidence for anomalous dynamic scaling in conserved surface growth. *Surface Science*, **607**:138, (2013).
- [61] Shaun Clarke and Dimitri D. Vvedensky. Origin of reflection high-energy electron-diffraction intensity oscillations during molecular-beam epitaxy: A computational modeling approach. *Phys. Rev. Lett.*, **58**:2235, (1987).
- [62] Shaun Clarke and Dimitri D. Vvedensky. Growth kinetics and step density in reflection high energy electron diffraction during molecular beam epitaxy. *Journal of Applied Physics*, **63**:2272, (1988).
- [63] T A de Assis and F D A Aarão Reis. Dynamic scaling and temperature effects in thin film roughening. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2015**:P06023, (2015).
- [64] F D A Aarão Reis. Scaling of local roughness distributions. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2015**:P11020, (2015).

- [65] I. S. S. Carrasco and T. J. Oliveira. Universality and dependence on initial conditions in the class of the nonlinear molecular beam epitaxy equation. *Phys. Rev. E*, **94**:050801, (2016).
- [66] Joachim Krug. Turbulent interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, **72**:2907, (1994).
- [67] Anna Chame and F.D.A. Aarão Reis. Scaling of local interface width of statistical growth models. *Surface Science*, **553**:1454, (2004).
- [68] Zhi-Peng Xun, Zhe Zhang, Ling Wu, Hui Xia, Da peng Hao, Yi Yang, Yi-Li Chen, and Gang Tang. Large-scale numerical study on the dynamic scaling behavior of Das Sarma-T amborenea model by employing noise reduction technique. *EPL (Europhysics Letters)*, **111**:60012, (2015).
- [69] C. Dasgupta, S. Das Sarma, and J. M. Kim. Controlled instability and multiscaling in models of epitaxial growth. *Phys. Rev. E*, **54**:R4552, (1996).
- [70] C.-K. Peng, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. Simons, H. E. Stanley, and A. L. Goldberger. Mosaic organization of dna nucleotides. *Phys. Rev. E*, **49**:1685, (1994).
- [71] T. Vicsek F. Family. Scaling of the active zone in the eden process on percolation networks and the ballistic deposition model. *J. Phys. A*, **18**:L75, (1985).
- [72] Kazumasa A. Takeuchi and Masaki Sano. Universal fluctuations of growing interfaces: Evidence in turbulent liquid crystals. *Phys. Rev. Lett.*, **104**:230601, (2010).
- [73] Kazumasa A. Takeuchi. Crossover from growing to stationary interfaces in the kardar-parisi-zhang class. *Phys. Rev. Lett.*, **110**:210604, (2013).
- [74] T. Sasamoto H. Sphon K. A. Takeuchi, M. Sano. Growing interfaces uncover universal fluctuations behind scale invariance. *Sci. Rep.*, **1**:34, (2011).
- [75] M. Myllys, J. Maunuksela, M. J. Alava, T. Ala-Nissila, and J. Timonen. Scaling and noise in slow combustion of paper. *Phys. Rev. Lett.*, **84**:1946, (2000).
- [76] J. Maunuksela, M. Myllys, O.-P. Kähkönen, J. Timonen, N. Provatas, M. J. Alava, and T. Ala-Nissila. Kinetic roughening in slow combustion of paper. *Phys. Rev. Lett.*, **79**:1515, (1997).
- [77] Bernardo A. Mello, Alaor S. Chaves, and Fernando A. Oliveira. Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid. *Phys. Rev. E*, **63**:041113, (2001).
- [78] Jin Min Kim and J. M. Kosterlitz. Growth in a restricted solid-on-solid model. *Phys. Rev. Lett.*, **62**:2289, (1989).
- [79] M. C. Lafouresse, P. J. Heard, and W. Schwarzacher. Anomalous scaling for thick electrodeposited films. *Phys. Rev. Lett.*, **98**:236101, (2007).
- [80] M.V. Ramana Murty and B.H. Cooper. Influence of step edge diffusion on surface morphology during epitaxy. *Surface Science*, **539**:91, (2003).

- [81] M. V. Ramana Murty and B. H. Cooper. Instability in molecular beam epitaxy due to fast edge diffusion and corner diffusion barriers. *Phys. Rev. Lett.*, **83**:352, (1999).
- [82] K. J. Caspersen, A. R. Layson, C. R. Stoldt, V. Fournee, P. A. Thiel, and J. W. Evans. Development and ordering of mounds during metal(100) homoepitaxy. *Phys. Rev. B*, **65**:193407, (2002).
- [83] P. Córdoba-Torres, I. N. Bastos, and R. P. Nogueira. Anomalous kinetic roughening during anodic dissolution of polycrystalline Fe. *Phys. Rev. E*, **77**:031602, (2008).
- [84] Mario Castro, Rodolfo Cuerno, Angel Sánchez, and Francisco Domínguez-Adame. Anomalous scaling in a nonlocal growth model in the Kardar-Parisi-Zhang universality class. *Phys. Rev. E*, **57**:R2491, (1998).
- [85] Juan M. López, Miguel A. Rodríguez, and Rodolfo Cuerno. Superroughening versus intrinsic anomalous scaling of surfaces. *Phys. Rev. E*, **56**:3993, (1997).
- [86] Juan M. López and Miguel A. Rodríguez. Lack of self-affinity and anomalous roughening in growth processes. *Phys. Rev. E*, **54**:R2189, (1996).
- [87] José J. Ramasco, Juan M. López, and Miguel A. Rodríguez. Generic dynamic scaling in kinetic roughening. *Phys. Rev. Lett.*, **84**:2199, (2000).
- [88] S. Das Sarma, S. V. Ghaisas, and J. M. Kim. Kinetic super-roughening and anomalous dynamic scaling in nonequilibrium growth models. *Phys. Rev. E*, **49**:122, (1994).
- [89] Jacques G. Amar, Pui-Man Lam, and Fereydoon Family. Groove instabilities in surface growth with diffusion. *Phys. Rev. E*, **47**:3242, (1993).
- [90] Heiko Leschhorn and Lei-Han Tang. Comment on “elastic string in a random potential”. *Phys. Rev. Lett.*, **70**:2973, (1993).
- [91] J. Asikainen, S. Majaniemi, M. Dubé, and T. Ala-Nissila. Interface dynamics and kinetic roughening in fractals. *Phys. Rev. E*, **65**:052104, (2002).
- [92] Rodolfo Cuerno and Mario Castro. Transients due to instabilities hinder Kardar-Parisi-Zhang scaling: A unified derivation for surface growth by electrochemical and chemical vapor deposition. *Phys. Rev. Lett.*, **87**:236103, (2001).
- [93] M. Schroeder, M. Siegert, D. E. Wolf, J. D. Shore, and M. Plischke. Scaling of growing surfaces with large local slopes. *Europhysics Letters*, **24**:563, (1993).
- [94] P. Córdoba-Torres, T. J. Mesquita, I. N. Bastos, and R. P. Nogueira. Complex dynamics during metal dissolution: From intrinsic to faceted anomalous scaling. *Phys. Rev. Lett.*, **102**:055504, (2009).
- [95] Juan M. López and Jean Schmittbuhl. Anomalous scaling of fracture surfaces. *Phys. Rev. E*, **57**:6405, (1998).
- [96] J. G. Moreira, J. K. L. da Silva, and S. O. Kamphorst. On the fractal dimension of self-affine profiles. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **27**:8079, (1994).

- [97] A.P.F. Atman, J.G. Vivas Miranda, A. Paz Gonzalez, and J.G. Moreira. Lattice model for approximate self-affine soil profiles. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **295**:64, (2001).
- [98] W. T. Vetterling W. H. Press, S. A. Teukolsky and B. P. Flannery. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. 3rd ed. (Cambridge University Press, New York, 2007).
- [99] Edwin E. Mozo Luis, Thiago A. de Assis, and Silvio C. Ferreira. Optimal detrended fluctuation analysis as a tool for the determination of the roughness exponent of the mounded surfaces. *Phys. Rev. E*, **95**:042801, (2017).
- [100] Su-Chan Park, Doochul Kim, and Jeong-Man Park. Derivation of continuum stochastic equations for discrete growth models. *Phys. Rev. E*, **65**:015102, (2001).
- [101] Milan Předota and Miroslav Kotrla. Stochastic equations for simple discrete models of epitaxial growth. *Phys. Rev. E*, **54**:3933, (1996).
- [102] Jin Min Kim and J. M. Kosterlitz. Growth in a restricted solid-on-solid model. *Phys. Rev. Lett.*, **62**:2289, (1989).
- [103] P. Punyindu and S. Das Sarma. Noise reduction and universality in limited-mobility models of nonequilibrium growth. *Phys. Rev. E*, **57**:R4863, (1998).
- [104] P. Disrattakit, R. Chanphana, and P. Chatraphorn. Roughness distribution of multiple hit and long surface diffusion length noise reduced discrete growth models. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **462**:619, (2016).
- [105] P Meakin, J Kertesz, and T Vicsek. Noise-reduced diffusion-limited deposition. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 21(5):1271–1281, mar 1988.
- [106] Richard L. Schwoebel and Edward J. Shipsey. Step motion on crystal surfaces. *Journal of Applied Physics*, **37**:3682, (1966).
- [107] Gert Ehrlich and F. G. Hudda. Atomic view of surface self diffusion: Tungsten on tungsten. *The Journal of Chemical Physics*, **44**:1039, (1966).
- [108] M. V. Berry and Z. V. Lewis. On the Weierstrass-Mandelbrot fractal function. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, **370**:459, (1980).
- [109] Evandro A Rodrigues, Bernardo A Mello, and Fernando A Oliveira. Growth exponents of the etching model in high dimensions. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **48**:035001, (2014).
- [110] T. J. Oliveira, S. G. Alves, and S. C. Ferreira. Kardar-parisi-zhang universality class in 2+1 dimensions: Universal geometry-dependent distributions and finite-time corrections. *Phys. Rev. E*, **87**:040102(R), (2013).
- [111] I S S Carrasco, K A Takeuchi, S C Ferreira, and T J Oliveira. Interface fluctuations for deposition on enlarging flat substrates. *New Journal of Physics*, **16**:123057, (2014).

- [112] T. J. Oliveira and F. D. A. Aarão Reis. Roughness exponents and grain shapes. *Phys. Rev. E*, **83**:041608, (2011).
- [113] H. K. Janssen. On critical exponents and the renormalization of the coupling constant in growth models with surface diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, **78**:1082, (1997).
- [114] Helmut Sitter Marian A. Herman. *Molecular Beam Epitaxy: Fundamentals and Current Status*. (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2 edition, 1996).
- [115] Helmut Sitter Marian A. Herman, . Wolfgang Richter. *Epitaxy: Physical Principles and Technical Implementation*. (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition, 2004).
- [116] Joachim Krug. Origins of scale invariance in growth processes. *Advances in Physics*, **46**:139, (1997).
- [117] Alberto Pimpinelli, Jacques Villain, and Dietrich E. Wolf. Fractal terraces in mbe growth. *J. Phys. I France*, **3**:447, (1993).
- [118] Paolo Politi, Geneviève Grenet, Alain Marty, Anne Ponchet, and Jacques Villain. Instabilities in crystal growth by atomic or molecular beams. *Physics Reports*, **324**:271, (2000).
- [119] S. Das Sarma. Kinetic surface roughening and molecular beam epitaxy. *Fractals*, **1**:784, (1993).
- [120] F. D. A. Aarão Reis. Universality in two-dimensional kardar-parisi-zhang growth. *Phys. Rev. E*, **69**:021610, (2004).
- [121] Washington S. Alves, Evandro A. Rodrigues, Henrique A. Fernandes, Bernardo A. Mello, Fernando A. Oliveira, and Ismael V. L. Costa. Analysis of etching at a solid-solid interface. *Phys. Rev. E*, **94**:042119, (2016).
- [122] Waldenor P. Gomes, André L. A. Penna, and Fernando A. Oliveira. From cellular automata to growth dynamics: The Kardar-Parisi-Zhang universality class. *Phys. Rev. E*, **100**:020101, (2019).
- [123] N. Metropolis and S. Ulam. The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, **44**:335, (1949).
- [124] Arthur F. Voter. Introduction to the kinetic Monte Carlo method. *Springer Netherlands*, **364**:1, (2007).
- [125] Jiaxiang Li, Zhipeng Xun, Ling Wu, Ruitao Li, and Gang Tang. Schramm-loewner evolution theory of the asymptotic behaviors of (2+1)-dimensional das sarma–tamborenea model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **530**:121554, (2019).
- [126] J Kertesz and D E Wolf. Noise reduction in eden models: II. surface structure and intrinsic width. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **21**:747, (1988).

- [127] F F Leal, T J Oliveira, and S C Ferreira. Kinetic modelling of epitaxial film growth with up- and downward step barriers. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2011**:P09018, (2011).
- [128] Jianqiao Huang, Gangshi Hu, Gerassimos Orkoulas, and Panagiotis D. Christofides. Lattice-size dependence and dynamics of surface mean slope in a thin film deposition process. *IFAC Proceedings Volumes*, **43**:811, (2010).
- [129] Jianqiao Huang, Gangshi Hu, Gerassimos Orkoulas, and Panagiotis D. Christofides. Dependence of film surface roughness and slope on surface migration and lattice size in thin film deposition processes. *Chemical Engineering Science*, **65**(23):6101, (2010).
- [130] J Krug and P Meakin. Universal finite-size effects in the rate of growth processes. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **23**:L987, (1990).
- [131] Yen-Liang Chou and Michel Pleimling. Kinetic roughening, global quantities, and fluctuation–dissipation relations. *Physica A*, **91**:3585, (2012).
- [132] Christoph A. Haselwandter and Dimitri D. Vvedensky. Multiscale theory of fluctuating interfaces: Renormalization of atomistic models. *Phys. Rev. Lett.*, **98**:046102, (2007).
- [133] Christoph A. Haselwandter and Dimitri D. Vvedensky. Renormalization of stochastic lattice models: Basic formulation. *Phys. Rev. E*, **76**:041115, (2007).
- [134] Christoph A. Haselwandter and Dimitri D. Vvedensky. Renormalization of stochastic lattice models: Epitaxial surfaces. *Phys. Rev. E*, **77**:061129, (2008).
- [135] Yen-Liang Chou and Michel Pleimling. Kinetic roughening, global quantities, and fluctuation–dissipation relations. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **391**:3585, (2012).
- [136] Thiago A. de Assis and Fábio D.A. Aarão Reis. Dissolution of minerals with rough surfaces. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **228**:27, (2018).