

Universidade Federal de Santa Catarina
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas
Departamento de Física

**DINÂMICA DE SUPERFÍCIE NA DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS
DE DIFERENTES TAMANHOS**

Fabricio Luchesi Forgerini

Orientador
Prof. Dr. Wagner Figueiredo

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da
Universidade Federal de Santa Catarina como parte dos requisitos
para obtenção do Título de Mestre em Física.

Florianópolis, Abril de 2008

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço ao Professor Wagner por sua dedicação e paciência, em anos de orientação. Obrigado por todo seu apoio e confiança, dentro e fora da Universidade.

Agradeço também aos colegas do curso de Física, que sempre mostraram-se muito solícitos em todas as situações. Em especial, aos integrantes do Grupo de Mecânica Estatística, pelo auxílio, cooperação, amizade e proveitosas discussões durante os cafés. Aos amigos dos outros cursos, o meu muito obrigado, já que nem tudo é trabalho.

À minha família, agradeço pelo apoio incondicional, em todas as minhas decisões.

Gostaria de agradecer ainda a Grasiely, por ser companheira, amiga e incentivadora fundamental em todos os rumos que a vida nos leva.

Finalmente, meus agradecimentos ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Resumo

Estudamos o crescimento de superfícies formadas pela deposição de partículas de diferentes tamanhos. Propomos um modelo onde as partículas são agregadas em um substrato inicialmente plano, fazendo aparecer após certo tempo, uma interface rugosa e um volume bastante poroso. Utilizando simulações de Monte Carlo, depositamos misturas de partículas de diversos tamanhos bem como partículas idênticas em um substrato inicialmente plano. No caso da deposição de partículas de diferentes tamanhos, as mesmas são selecionadas de uma distribuição de *Poisson*, onde a variação de tamanho é de cerca de uma ordem de grandeza. Já os depósitos obtidos por deposição de partículas idênticas, somente são consideradas partículas maiores do que um parâmetro de rede.

Em ambos os casos, as partículas são depositadas seguindo as mesmas regras do modelo de deposição aleatória, porém, neste trabalho, permitimos que as partículas possam ser refletidas pela superfície e, dessa forma, não serem agregadas ao substrato. Determinamos os expoentes usuais no estudo de deposição de partículas, ou seja, os expoentes de rugosidade, de crescimento e o dinâmico (α , β e z), respectivamente. Também estudamos a porosidade do volume formado, determinando a porosidade global P em função do tamanho da partícula e o correspondente expoente de escala ρ para redes em uma e duas dimensões.

Os resultados de nossas simulações sugerem que a evolução temporal da rugosidade de superfície apresenta três comportamentos distintos. Nos tempos iniciais, o modelo apresenta um comportamento similar ao do modelo de deposição aleatória. Para tempos intermediários, observamos que a rugosidade de superfície cresce mais suavemente, e finalmente, para tempos longos, atinge o regime de saturação. O estudo do volume formado pela deposição de partículas de diferentes tamanhos nos mostra que a porosidade cresce rapidamente nos instantes iniciais, atingindo também um regime de saturação. Com exceção do caso em que as partículas depositadas têm o mesmo tamanho da célula unitária do substrato, a largura de interface e a porosidade correspondente sempre atingem um valor limite para tempos longos.

Abstract

We studied the surface growth generated by the deposition of particles of different sizes. A model is proposed where the particles are aggregated on an initial flat surface, giving rise to a rough interface and a porous bulk. By using Monte Carlo simulations, a surface has grown by adding particles of different sizes, as well as identical particles on the substrate. In the case of deposition of particles of different sizes, they are selected from a Poisson distribution, where the particle's sizes may change by one order of magnitude. For the deposition of identical particles, only particles which are larger than one lattice parameter are considered.

In both cases, the particles are deposited following the rules of the random deposition model, however, in this work, we allow the reflection of a particle by the surface and, in this way, not to be added on the substrate. We calculated the usual scaling exponents, the roughness, growth and dynamic exponents (α, β, z), respectively. We also studied the porosity in the bulk, determining the global porosity P as a function of the particle size and the scaling exponent of the porosity ρ in one and two dimensions.

The results of our simulations show that the roughness evolves in time following three different behaviors. The roughness in the initial times behaves as in the random deposition model. At intermediate times, the surface roughness grows slowly and finally, for a long time, it enters into the saturation regime. The study of the bulk formed by the deposition of larger particles reveals us a porosity increasing very fast at the initial times, and also reaching a saturation value. Excepting the case where particles have the same size of one lattice spacing, we always find that the surface roughness and porosity reach limiting values at long times.

SUMÁRIO

Lista de Figuras	vi
Lista de Tabelas	ix
1 Introdução	1
2 Modelos de Crescimento de Superfícies	5
2.1 Modelos de Crescimento	5
2.2 Modelo de Deposição Aleatória	8
2.3 Modelo de Deposição Aleatória com Relaxação de Superfície: Equação de Edwards-Wilkinson	11
2.4 Modelo de Deposição Balística	14
2.5 Equação de Kardar-Parisi-Zhang	15
2.6 Porosidade no crescimento de superfícies	18
3 Deposição de Partículas de Diferentes Tamanhos em (1 + 1) Dimensões	20
3.1 Introdução	20
3.2 Descrição do Modelo	20
3.3 Determinação dos Expoentes de Escala	27
3.3.1 Resultados para deposição de partículas de diferentes tamanhos	28
3.3.2 Resultados para a deposição de partículas idênticas	32
3.4 Estudo da Porosidade	39
3.4.1 Resultados para deposição de partículas de diferentes tamanhos	40
3.4.2 Deposição de partículas idênticas	43

4	Deposição de Partículas em (2 + 1) Dimensões	49
4.1	Introdução	49
4.2	Expoentes de Escala	50
5	Conclusões e Perspectivas	55
	Referências	57

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1:	<i>Representação esquemática da evolução temporal da rugosidade e dos tempos de “crossover”(t_c) e saturação (t_x) [18].</i>	7
Figura 2.2:	<i>Regra de deposição no modelo aleatório.</i>	9
Figura 2.3:	<i>Regras para a deposição aleatória com relaxação de superfície. . . .</i>	12
Figura 2.4:	<i>Regras para a deposição balística de partículas.</i>	14
Figura 2.5:	<i>Deposição Balística em uma dimensão e $L = 200$.</i>	14
Figura 2.6:	<i>Origem do termo não linear na equação de KPZ [1].</i>	16
Figura 3.1:	<i>Imagem feita por microscopia eletrônica da superfície de um depósito formado por partículas de fuligem.</i>	22
Figura 3.2:	<i>Distribuição dos tamanhos das partículas sorteadas, baseadas na distribuição de Poisson, com valor médio igual 5.</i>	23
Figura 3.3:	<i>Regras de deposição de partículas no modelo. A linha cheia representa a interface da superfície, enquanto que as partículas A e B estão sendo depositadas. A partícula A é rejeitada enquanto que a B é adicionada ao substrato, criando uma zona de “sombra”, o que dá origem aos poros no volume.</i>	24
Figura 3.4:	<i>Regras de deposição de partículas idênticas. Neste caso, são depositadas partículas de tamanho 4 apenas. A partícula A é rejeitada enquanto que a partícula B é agregada, criando agora duas zonas distintas de “sombra”.</i>	26
Figura 3.5:	<i>$\ln(\omega)$ versus $\ln(t)$ para a deposição de partículas de diferentes tamanhos em substratos de tamanhos $L = 128, 256, 512$ e 1024.</i>	28

Figura 3.6:	<i>ln(ω) versus ln(t) para a deposição de partículas de tamanhos entre 1 e 9, em uma rede $L = 256$. O quadro mostra os valores dos ajustes lineares para tempos inferiores ao tempo de “crossover”(t_c), entre t_c e o tempo de saturação (t_x) e para o valor de saturação, maiores que t_x.</i>	29
Figura 3.7:	<i>Rugosidade de superfície para a deposição de partículas de diferentes tamanhos. O gráfico (a) representa uma rede com $L = 128$, (b) $L = 256$, (c) $L = 512$ e (d) $L = 1024$.</i>	31
Figura 3.8:	<i>Cálculo do expoente de saturação (α) para a deposição de partículas de diferentes tamanhos.</i>	31
Figura 3.9:	<i>Deposição de partículas de tamanho 4 em um substrato linear unidimensional.</i>	33
Figura 3.10:	<i>Rugosidade de superfície para a deposição de partículas idênticas, em uma rede com $L = 128$. Os agregados são formados por partículas de tamanho 2 (a), tamanho 4 (b), tamanho 6 (c) e tamanho 8 (d).</i>	34
Figura 3.11:	<i>Rugosidade de superfície para a deposição de partículas idênticas, em uma rede com $L = 256$. Agregado formado por partículas de tamanho 2 (a), tamanho 4 (b), tamanho 6 (c) e tamanho 8 (d).</i>	36
Figura 3.12:	<i>Rugosidade de superfície para a deposição de partículas idênticas, em uma rede com $L = 512$. Agregado formado por partículas de tamanho 2 (a), tamanho 4 (b), tamanho 6 (c) e tamanho 8 (d).</i>	37
Figura 3.13:	<i>Rugosidade de superfície para a deposição de partículas idênticas, em uma rede com $L = 1024$. Agregado formado por partículas de tamanho 2 (a), tamanho 4 (b), tamanho 6 (c) e tamanho 8 (d).</i>	38
Figura 3.14:	<i>Resultados para o expoente da saturação da rugosidade α para (a) partículas de tamanho 2, (b) 4, (c) 6 e (d) 8.</i>	39
Figura 3.15:	<i>Evolução temporal da porosidade determinada para depósitos de partículas de diferentes tamanhos em redes de tamanho (a) 128 e (b) 256.</i>	41
Figura 3.16:	<i>Evolução temporal da porosidade determinada para depósitos de partículas de diferentes tamanhos em redes de tamanho (a) 512 e (b) 1024.</i>	42

Figura 3.17:	<i>Evolução temporal da porosidade para depósitos em um substrato de tamanho $L = 1024$ e diferentes partículas, com (a) $N = 2$, (b) $N = 3$ e (c) $N = 4$.</i>	44
Figura 3.18:	<i>Evolução temporal da porosidade para depósitos em um substrato de tamanho $L = 1024$ e diferentes partículas, com (a) $N = 5$, (b) $N = 6$ e (c) $N = 7$.</i>	46
Figura 3.19:	<i>Evolução temporal da porosidade para depósitos em um substrato de tamanho $L = 1024$ e diferentes tamanhos de partículas. (a) $N = 8$ e (b) $N = 9$.</i>	47
Figura 3.20:	<i>Porosidade dos depósitos formados em função do tamanho da partícula, para uma rede com $L = 1024$.</i>	48
Figura 3.21:	<i>Porosidade dos depósitos formados por partículas de tamanhos 1 e 2, em redes lineares com $L = 128, 256$ e 512.</i>	48
Figura 4.1:	<i>Rugosidade de superfície para a deposição de partículas em $(2 + 1)$ dimensões numa rede quadrada de tamanho $L = 32$. No gráfico (a) temos um depósito de partículas de tamanhos 1 e 2, (b) tamanho 2, (c) tamanho 3 e (d) tamanho 4.</i>	50
Figura 4.2:	<i>Rugosidade de superfície para a deposição de partículas em $(2 + 1)$ dimensões numa rede quadrada de tamanho $L = 32$. No gráfico (a) temos um depósito de partículas de tamanho 6, (b) tamanho 8, (c) tamanho 9 e (d) mistura de partículas.</i>	51
Figura 4.3:	<i>Rugosidade de superfície para a deposição de partículas em $(2 + 1)$ dimensões para uma rede de tamanho $L = 64$. No gráfico (a) temos um depósito de partículas de tamanhos 1 e 2, (b) tamanho 2, (c) tamanho 3 e (d) tamanho 4.</i>	53
Figura 4.4:	<i>Rugosidade de superfície para a deposição de partículas em $(2 + 1)$ dimensões para uma rede de tamanho $L = 64$. No gráfico (a) temos um depósito de partículas de tamanho 6, (b) tamanho 8, (c) tamanho 9 e (d) mistura de partículas.</i>	54

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1:	<i>Expoentes de escala e equações associadas para três modelos de deposição de partículas [1].</i>	17
Tabela 3.1:	<i>Expoentes de crescimento, valor de saturação da rugosidade, expoente dinâmico e de saturação para depósitos formados por partículas de diferentes tamanhos.</i>	30
Tabela 3.2:	<i>Expoentes de crescimento β_1, β_2, valor de saturação da rugosidade, e expoente dinâmico para uma rede de tamanho $L = 128$ e depósitos formados por partículas de tamanhos de 2 a 8.</i>	33
Tabela 3.3:	<i>Expoentes de crescimento β_1, β_2, valor de saturação da rugosidade, e expoente dinâmico para uma rede de tamanho $L = 256$ e depósito formado por partículas de tamanhos de 2 a 8.</i>	36
Tabela 3.4:	<i>Expoentes de crescimento β_1, β_2, valor de saturação da rugosidade, e expoente dinâmico para uma rede de tamanho $L = 512$ e depósito formado por partículas de tamanhos de 2 a 8.</i>	37
Tabela 3.5:	<i>Expoentes de crescimento β_1, β_2, valor de saturação da rugosidade, e expoente dinâmico para uma rede de tamanho $L = 1024$ e depósito formado por partículas de tamanhos de 2 a 8.</i>	38
Tabela 3.6:	<i>Valores dos expoentes de saturação da rugosidade α para depósitos formados por partículas de tamanhos de 2 a 8.</i>	39
Tabela 4.1:	<i>Expoentes de crescimento β_1, β_2 e valor de saturação da rugosidade para uma rede quadrada com $L = 32$, e depósitos formados por partículas de tamanhos variados.</i>	52
Tabela 4.2:	<i>Expoentes de crescimento β_1, β_2 e valor de saturação da rugosidade para uma rede quadrada com $L = 64$ e depósitos formados por partículas de tamanhos variados.</i>	53

1 INTRODUÇÃO

Muito progresso foi alcançado nas últimas décadas no estudo da formação de padrões de superfícies e de interfaces devido à deposição de partículas. Buscar o entendimento das leis básicas que regem o comportamento e a dinâmica desses processos fora do equilíbrio tem sido o objeto de investigação de pesquisadores de diversas áreas do conhecimento, pois em uma área multidisciplinar como essa, as contribuições têm sido dadas por físicos, químicos, matemáticos, engenheiros de materiais, entre outros [1].

Na formação de interfaces e superfícies, há uma gama imensa de parâmetros que têm influência em seu desenvolvimento e é praticamente impossível que se possa distinguir experimentalmente cada um desses parâmetros. “Contudo, um cientista sempre espera que exista um pequeno número de leis básicas que determinem a morfologia e a dinâmica do crescimento. As ações dessas leis básicas podem ser descritas microscopicamente através de modelos de crescimento, modelos que sintetizam a física essencial e ignoram muitos outros detalhes”[1].

O crescimento de superfícies e interfaces pode ser encontrado na natureza nas mais diversas áreas, como na formação de membranas celulares, no crescimento de colônias de bactérias, bem como em processos de deposição, como o de flocos de neve em uma janela de vidro ou formações rochosas criadas pelo depósito de grãos de poeira.

Compreender a dinâmica desses processos de crescimento é de interesse tanto tecnológico quanto teórico para as ciências onde a morfologia das superfícies e das interfaces é um fator crítico. As áreas que estudam o crescimento de cristais têm interesse direto na compreensão dos fenômenos envolvidos, visto que o controle cada vez maior de processos de crescimento pode levar a produção de dispositivos tecnológicos cada vez mais eficientes e precisos. Do ponto de vista teórico, a mecânica estatística procura encontrar as características fundamentais que descrevem o comportamento desses sistemas tão complexos, o que torna o trabalho nessa área ao mesmo tempo desafiador, motivante e importante.

Alguns aspectos dos processos reais de crescimento são extremamente complexos e com inúmeros fatores, o que nos faz simplificar o problema até um ponto em que possa ser compreendido e tratado. Uma das maneiras de se entender esses processos e tratá-los matematicamente é através de equações contínuas de crescimento. Dessa forma, associamos a um processo específico, uma equação diferencial estocástica que o represente, como veremos no capítulo 2, pelas equações de Edwards e Wilkinson (EW) e de Kardar, Parisi e Zhang (KPZ).

Muitas vezes, porém, as equações contínuas não apresentam soluções exatas para certas classes de problemas ou para certas dimensões espaciais, o que torna difícil o seu uso em grande parte dos problemas de interesse físico ou tecnológico. Uma outra maneira de se abordar esses problemas, é através da introdução de modelos discretos de crescimento, onde por meio de modelos simples e com o uso de simulações computacionais, é possível obter-se resultados que em muitos casos estão plenamente de acordo com os resultados determinados por meio de técnicas experimentais.

Em ambas as abordagens, seja por meio de equações no contínuo ou por meio de modelos discretos e simulações computacionais, sempre se procura por características universais, utilizando-se conceitos de escala e de universalidade, bem como da geometria fractal. O que desejamos neste trabalho é encontrar os expoentes de escala de alguns modelos de crescimento, e determinar a classe de universalidade a qual o modelo pertence. Rugosidade, porosidade, entre outros, são as propriedades utilizadas nas análises dos problemas envolvendo a dinâmica de crescimentos de superfície, sua morfologia e o volume formado pelos depósitos.

As Leis de Potência “têm um papel fundamental no estudo de fractais e crescimento de superfícies, pois simetrias importantes podem ser expressas na forma de funções invariantes a transformações de escala, assumindo a mesma forma em todas as escalas”[2]. Em função das simetrias exibidas pelo sistema em estudo, os expoentes obtidos por meio de uma mudança de escala nas leis de potência, definem as características dos modelos de crescimento. Para uma grande variedade de fenômenos, estes expoentes são universais, ou seja, invariantes frente a pequenas mudanças nos processos físicos ou nos modelos, e que representam a física essencial por trás das Leis de Potência.

Através de simulações computacionais, principalmente as técnicas de Monte Carlo, grandes avanços foram obtidos nessa área [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11]. Modelos baseados

nas mais variadas aplicações têm sido propostos e estudados com o uso de algoritmos apropriados e cálculos numéricos. A essência desse trabalho está baseada em simulações de Monte Carlo, onde realizamos cálculos para alguns modelos de crescimento envolvendo a deposição de partículas de diferentes tamanhos sobre um substrato plano. Alguns trabalhos apresentam, de forma geral, uma combinação de dois ou mais modelos de deposição, representando as características físicas essenciais de cada um [12, 13, 14].

No capítulo 2 é apresentada uma revisão da literatura referente aos temas aqui abordados, como os conceitos de escala aplicados à dinâmica de crescimento de superfícies, os expoentes de rugosidade, de crescimento e dinâmico (α , β e z). Análises mais comuns são apresentadas brevemente neste capítulo, como forma de caracterizar superfícies e interfaces para os modelos de crescimento. Os modelos de Deposição Aleatória, Deposição Aleatória com Relaxação Superficial e Deposição Balística são apresentados como modelos básicos para um estudo inicial e ponto de partida para a compreensão de outros modelos. As equações diferenciais de crescimento EW e KPZ também são apresentadas neste capítulo. Para a equação KPZ, a determinação dos expoentes de escala para $d = 1$ e para dimensões superiores pode ser vista em [1].

O modelo estudado nesta dissertação é apresentado no capítulo 3, suas regras de deposição, algoritmo de agregação de partículas e os resultados obtidos. O modelo proposto consiste de dois estudos ligeiramente diferentes: o depósito de partículas de diferentes tamanhos agregadas em um mesmo substrato e uma série de depósitos de partículas de apenas um tipo. No caso de partículas de diferentes tamanhos, as mesmas são selecionadas de uma distribuição de *Poisson* modificada, onde a variação em tamanho é de aproximadamente uma ordem de grandeza. Para este caso foram realizadas diversas simulações para encontrar os expoentes que caracterizam a dinâmica de crescimento, além de um estudo da porosidade do volume formado. Já para o segundo estudo, foram depositadas partículas idênticas em cada substrato, onde fixamos o tamanho das partículas para cada deposição realizada. Em todos os casos, as partículas foram agregadas seguindo as regras do modelo de deposição aleatório, e observamos que a inclusão de diferentes tamanhos leva a um comportamento tipicamente balístico na estrutura final dos agregados formados.

As simulações computacionais realizadas e as análises apresentadas neste capítulo são referentes ao modelo em $(1 + 1)$ dimensões. Os resultados apresentados nesta dissertação correspondem a médias de diversas simulações realizadas para quatro diferentes tamanhos

de redes. Em particular, os resultados mostram a existência de dois regimes distintos de crescimento para o expoente β , um associado ao modelo de crescimento puramente aleatório e outro associado à classe de universalidade com crescimento lateral KPZ. Os estudos relativos à porosidade do depósito apontam para um rápido crescimento inicial, seguido de um regime estacionário.

Um estudo inicial das simulações em $(2 + 1)$ dimensões é apresentado no quarto capítulo, onde as regras de deposição são exatamente as mesmas consideradas no terceiro capítulo, porém devemos considerar cuidadosamente a forma das partículas. Neste caso, as partículas que são agregadas ao substrato têm largura de uma unidade de rede e comprimento variável. São adicionadas sempre perpendicularmente ao eixo de crescimento da superfície e podem assumir duas diferentes orientações paralelas ao substrato.

As análises e os estudos realizados são basicamente os mesmos feitos em $(1 + 1)$ dimensões, apresentando resultados ligeiramente diferentes. Observamos que nas nossas simulações, realizadas em $(2 + 1)$ dimensões, os expoentes de crescimento apresentam diferentes comportamentos dos observados anteriormente. Uma análise mais detalhada e simulações mais precisas são necessárias para entendermos esse comportamento, apresentando-se como uma perspectiva para futuras investigações. As conclusões finais e perspectivas para este trabalho são apresentadas no último capítulo.

2 MODELOS DE CRESCIMENTO DE SUPERFÍCIES

2.1 Modelos de Crescimento

Ao se estudar os modelos de crescimento e as equações que regem seu comportamento, precisamos definir alguns parâmetros essenciais e descrever brevemente os conceitos de escala que são associados aos modelos de crescimento. Nos modelos que serão aqui apresentados, L determina o tamanho linear da rede em questão e d a dimensão espacial dessa rede; para uma rede bidimensional temos L^2 sítios. Procuramos sempre encontrar grandezas que possam caracterizar uma superfície ou interface, como a dimensão fractal, a rugosidade da superfície, a altura de uma determinada posição na rede, a porosidade no volume gerado pelo crescimento da superfície e de que forma essas grandezas (quando aplicável) variam com o tempo. As medidas de tempo realizadas nas simulações numéricas de Monte Carlo são definidas em função de uma unidade de tempo conhecida como passo de Monte Carlo (*MCS*), definida como o tempo necessário para se *tentar* depositar um número de partículas igual ao número de sítios da rede.

Definimos a altura, em função do tempo e da posição de um sítio da rede, por $h(i, t)$ e a altura média da interface como

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

A rugosidade da superfície é definida pela largura da interface formada, ou seja, a flutuação quadrática média da altura,

$$\omega(L, t) \equiv \sqrt{\frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^{L^d} [h(i, t) - \bar{h}(t)]^2}. \quad (2.2)$$

Em geral, a rugosidade apresenta dois diferentes regimes de evolução temporal: um regime de crescimento e um regime de saturação. Inicialmente, a rugosidade cresce como uma lei de potência para tempos curtos e, depois de um tempo suficientemente longo,

satura. Essas características da evolução temporal da rugosidade dependem do modelo de deposição em questão, sendo que existem modelos (como o de deposição aleatória), onde a rugosidade não apresenta regime de saturação ou, em casos especiais, onde verifica-se que a rugosidade apresenta dois comportamentos distintos no seu crescimento, para os tempos iniciais.

Nos instantes iniciais, quando a rugosidade apresenta um crescimento tipo lei de potência, temos que

$$\omega(L, t) \sim t^\beta \quad (t \ll t_x), \quad (2.3)$$

onde o expoente β é chamado de expoente de crescimento e t_x representa, aproximadamente, o tempo onde ocorre uma mudança no regime de crescimento. Já no regime de saturação da rugosidade, a largura da interface apresenta uma dependência na forma de lei de potência

$$\omega_{sat}(L) \sim L^\alpha \quad (t \gg t_x), \quad (2.4)$$

onde α é o chamado expoente de rugosidade da superfície. A saturação da rugosidade com o tamanho do sistema sugere que esse é um efeito não local, pois no caso de um sistema de tamanho infinito ($L \rightarrow \infty$) não há saturação na rugosidade da superfície.

O tempo t_x geralmente é conhecido como tempo de saturação e depende do tamanho do sistema

$$t_x \sim L^z. \quad (2.5)$$

Os expoentes α , β e z não são todos independentes. Family e Vicsek mostraram através de uma relação de escala, que a rugosidade pode ser escrita em função apenas de dois expoentes α ou β e z [15]. Isto nos permite reescalar e deslocar as curvas da rugosidade em função do tempo e representar diferentes tamanhos de rede em um mesmo gráfico. Essa representação conjunta de sistemas de diferentes tamanhos nos permite estimar o tempo de saturação da rugosidade. Tomando-se um tempo próximo a t_x , partindo-se dos tempos iniciais, a rugosidade é proporcional a t^β , dado pela relação 2.3. Por outro lado, se partirmos de tempos grandes, temos que $w(t_x) \sim L^\alpha$, pela relação 2.4. Dessa forma, uma estimativa para o tempo de saturação é dada por $t_x^\beta \sim L^\alpha$, e a relação entre os expoentes de escala é

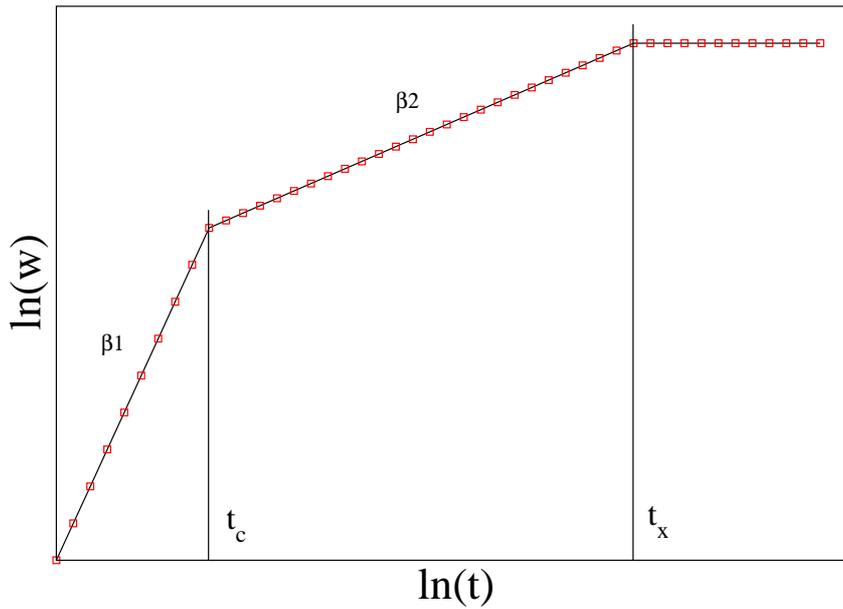


Figura 2.1: Representação esquemática da evolução temporal da rugosidade e dos tempos de “crossover” (t_c) e saturação (t_x) [18].

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (2.6)$$

Em alguns modelos de crescimento observamos diferentes comportamentos antes de se atingir o regime de saturação da rugosidade [16, 17, 18, 19]. Temos, nesses casos, dois expoentes distintos de crescimento, β_1 e β_2 . Na intersecção destes expoentes de crescimento, define-se o tempo de *crossover* t_c para a mudança de regime. A figura 2.1 representa graficamente esse tipo de comportamento onde os dois regimes são observados.

Uma forma de se estudar os modelos físicos que apresentam comportamento de escala é através da linguagem matemática dos fractais, que têm dado importantes contribuições para o desenvolvimento dessa área da Física. As estruturas fractais podem apresentar características geométricas e estatísticas semelhantes às interfaces geradas por diferentes modelos de crescimento. Fractais gerados por regras de construção determinísticas, ou mesmo por regras de construção aleatórias, apresentam-se como uma área de interesse para o estudo da dinâmica de crescimento de superfícies e evolução de interfaces.

Fractais auto-similares são objetos onde partes menores são similares ao objeto como um todo. São formados por uma regra de construção determinística, e por isso são invariantes frente a uma transformação isotrópica de escala. Dessa forma, interfaces e

superfícies encontradas na natureza, devido ao seu caráter aleatório, não apresentam características iguais aos objetos fractais auto-similares, a menos de um ponto de vista estatístico.

O método mais simples para se caracterizar uma estrutura fractal auto-similar é através da sua *Dimensão Fractal*:

$$d_f = \lim_{\ell \rightarrow 0} \frac{\ln N(\ell)}{\ln(\frac{1}{\ell})}, \quad (2.7)$$

onde $N(\ell)$ é o menor número de hipercubos de lado ℓ necessários para preencher o fractal [2].

Outra forma de estrutura fractal são os chamados fractais auto-afins, onde para permanecerem invariantes frente a uma transformação de escala, essa transformação deve ser anisotrópica. Esses objetos podem ser descritos por funções chamadas de *funções auto-afins* do tipo:

$$h(x) \sim b^{-\chi} h(bx), \quad (2.8)$$

onde, por exemplo, $h(x)$ representa a altura no intervalo onde o fractal está definido e χ nos fornece a medida da rugosidade associada a $h(x)$. Quando a transformação de escala para x ocorre ($x \rightarrow bx$), para retornarmos ao objeto fractal idêntico ao original, é necessário que $h \rightarrow b^\chi h$, dada a sua característica auto-afim. No caso especial onde $\chi = 1$, retorna-se a um fractal auto-similar.

A caracterização de superfícies rugosas como auto-afins, valendo-se dos conceitos de escala, as coloca juntamente com os modelos de crescimento nas chamadas *classes de universalidade*. Sistemas físicos que apresentam os mesmos expoentes de escala, são então colocados em uma mesma classe de universalidade. Mesmo possuindo diferentes tipos de interações e parâmetros, sistemas que apresentam os mesmos expoentes, e estão portanto na mesma classe de universalidade, exibem as mesmas características físicas essenciais.

2.2 Modelo de Deposição Aleatória

O modelo de Deposição Aleatória é o mais simples dos modelos de crescimento e apresenta solução exata. Neste modelo, a rugosidade não apresenta saturação, crescendo

indefinidamente com o tempo. Como todo modelo discreto de crescimento, existe uma regra de construção para ele.

A regra de construção do modelo é bem simples: em uma rede (no caso unidimensional) de tamanho L , cada partícula de tamanho unitário é depositada em um sítio da rede, escolhido aleatoriamente. Toda partícula sorteada é agregada ao substrato e a altura na posição do sítio escolhido é incrementada de uma unidade, já que as partículas sorteadas apresentam todas o mesmo tamanho, seja para modelos em uma dimensão ($d = 1$) ou para modelos em dimensões maiores. Dessa forma, como mostra a figura 2.2, a partícula é depositada no sítio escolhido, na posição imediatamente superior àquela de maior altura do sítio.

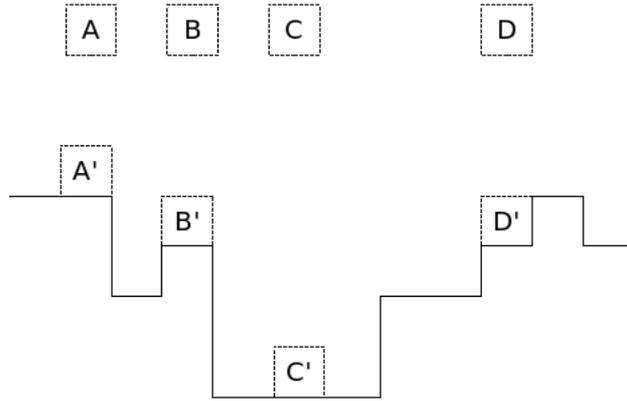


Figura 2.2: Regra de deposição no modelo aleatório.

A probabilidade de um sítio ser escolhido é $p = \frac{1}{L}$, de forma que a probabilidade de que uma coluna tenha uma altura h depois de N partículas depositadas é

$$P(h, N) = \binom{N}{h} p^h (1-p)^{N-h}. \quad (2.9)$$

Podemos calcular a altura média, usando agora a probabilidade de uma coluna ter certa altura depois de um número N de partículas depositadas,

$$\begin{aligned} \bar{h} &= \sum_{h=0}^N h P(h, N) = \sum_{h=0}^N h \binom{N}{h} p^h q^{N-h} = p \frac{\partial}{\partial p} \sum_{h=0}^N \binom{N}{h} p^h q^{N-h}, \\ \bar{h} &= p \frac{\partial}{\partial p} (p+q)^N, \end{aligned}$$

então

$$\bar{h} = pN(p + q)^{N+1} = pN = \frac{N}{L} = t. \quad (2.10)$$

O segundo momento da altura, definido pela altura quadrática média, é dado por

$$\langle h^2 \rangle = pN - p^2N(N - 1), \quad (2.11)$$

e, finalmente podemos determinar a largura da interface,

$$\begin{aligned} \omega^2(t) &= \langle (h - \bar{h})^2 \rangle = \langle h^2 - 2h\bar{h} + (\bar{h})^2 \rangle = \langle h^2 \rangle - \bar{h}^2, \\ \omega^2(t) &= pN(1 - p) = t\left(1 - \frac{1}{L}\right), \\ \omega(t) &\sim t^{\frac{1}{2}} \Rightarrow \beta = \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Obtemos assim, o valor do expoente de crescimento β para o modelo de deposição aleatória. O modelo de deposição aleatória gera uma interface bastante rugosa, que não satura com o tempo, além de não apresentar poros no volume formado.

Uma outra abordagem para o estudo da largura da interface neste modelo, é associar à interface uma equação estocástica que a represente. Procuramos uma equação diferencial que descreva a variação da altura com o tempo para cada posição x e que represente estatisticamente as características da interface. Ela pode ser escrita na forma:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \Phi(x, t), \quad (2.13)$$

onde $\Phi(x, t)$ é o número de partículas por unidade de tempo que são agregadas na posição x no instante de tempo t . A característica aleatória da deposição de partículas faz com que o fluxo possa ser escrito como uma soma de dois termos, de modo que a equação 2.13 toma a forma

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = F + \eta(x, t), \quad (2.14)$$

onde F representa o número médio de partículas por unidade de tempo que são agregadas ao substrato na posição x , e $\eta(x, t)$ representa a flutuação aleatória deste processo, um ruído que não apresenta correlação espacial no substrato. Por exemplo, a forma mais simples para o ruído é

$$\langle \eta(x, t) \rangle = 0, \quad (2.15)$$

e o segundo momento deste ruído

$$\langle \eta(x, t)\eta(x', t') \rangle = C\delta(x - x')\delta(t - t'), \quad (2.16)$$

de modo que não haja correlações no espaço e no tempo. Integrando-se no tempo a equação 2.14

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

a altura média da interface fica

$$\langle h(x, t) \rangle = Ft. \quad (2.18)$$

Tomando-se o quadrado da equação 2.17, $\langle h^2(x, t) \rangle = F^2t^2 + Ct$, e temos que $w^2(t) = Ct$. Assim, encontramos o mesmo resultado para o expoente de crescimento do caso discreto, ou seja $\beta = \frac{1}{2}$.

2.3 Modelo de Deposição Aleatória com Relaxação de Superfície: Equação de Edwards-Wilkinson

O modelo de deposição aleatória com relaxação de superfície possui certa semelhança com o modelo de deposição aleatória introduzido na seção anterior, porém, este exibe uma diferença básica: possui correlação entre os primeiros vizinhos. A existência de correlação nesse modelo implica na saturação da rugosidade que, diferentemente do modelo aleatório, atinge aqui um valor máximo. Dessa forma, temos o expoente de saturação α , que não é definido no modelo anterior.

Nesse tipo de crescimento de superfície, o sítio onde ocorre a deposição é aleatoriamente escolhido, porém a partícula a ser agregada ao substrato “procura” entre os sítios vizinhos, aquele de menor altura. Caso o sítio inicialmente sorteado e os seus vizinhos tenham todos a mesma altura, a partícula é aleatoriamente depositada, ou no sítio inicial ou em um de seus primeiros vizinhos. A figura 2.3 representa graficamente as regras do modelo.

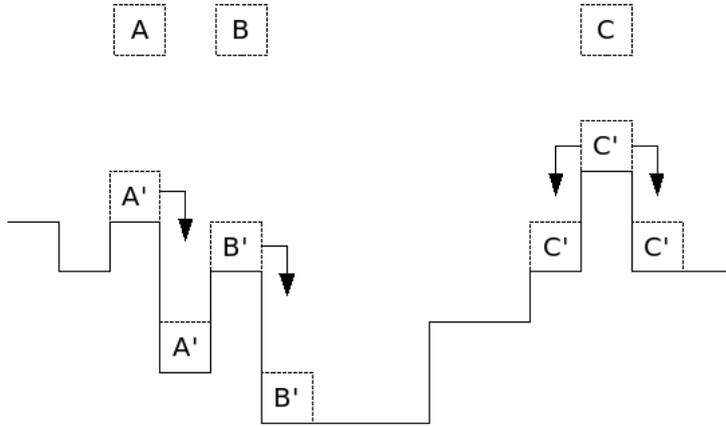


Figura 2.3: Regras para a deposição aleatória com relaxação de superfície.

Esse modelo de crescimento não apresenta solução exata para o caso discreto, como feito anteriormente. Porém, pode-se também associar a esse crescimento uma equação diferencial estocástica que o represente. De posse dessa equação, e valendo-se de argumentos de simetria, podemos encontrar os expoentes de crescimento desse modelo. Outra maneira de se encontrar os expoentes associados ao crescimento é através de simulações computacionais. A superfície formada por esse tipo de deposição é rugosa, mas a rugosidade satura com o tempo. O depósito formado não apresenta porosidade no volume gerado.

Por argumentos de simetria, pode-se chegar à equação diferencial estocástica que representa esse modelo de crescimento. Pensando em uma interface que tem a sua altura variando com o tempo e que depende também da posição do sítio em questão (visto que a partícula pode ser depositada em um sítio vizinho ao inicialmente sorteado) temos:

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = G(h, \vec{x}, t). \quad (2.19)$$

Considerando argumentos gerais de simetria [1], podemos construir a função $G(h, \vec{x}, t)$ e encontrar os termos que são função de h , \vec{x} e t . Assim:

1. Invariância Temporal: $T \rightarrow t + dt$.

Para atender a esta exigência, $G = G(h, \vec{x})$.

2. Invariância Translacional (na direção do crescimento): $h \rightarrow h + \delta h$.

Para atender a esse requisito, $G = G(\nabla h^n, \vec{x})$, pois ∇h^n é invariante frente a essa

translação.

3. Invariância Translacional (ortogonal ao crescimento): $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \delta\vec{x}$.

Neste caso, $G = G(\nabla h^n)$.

4. Simetria de inversão e rotação em torno da direção do crescimento: Para satisfazer esta condição, não se pode permitir a presença de derivadas de ordem ímpar, de modo que

$$G = G(\nabla^{2K} h), \text{ ou ainda, } G = G(\nabla^{2K+1} h)^{2l}.$$

5. Simetria *up/down* de h : $h \rightarrow -h$.

Neste caso, não se pode ter as derivadas $(\nabla h)^{2l}$ e, portanto, $G = G(\nabla^{2K} h)$.

Levando-se em conta todas essas considerações de simetria, podemos então escrever a equação estocástica que descreve o modelo na forma

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nabla^2 h + \nabla^4 h + \dots + \nabla^{2n} h + (\nabla^2 h)(\nabla h^2) + (\nabla^{2k} h)(\nabla h)^{2y} + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.20)$$

onde os coeficientes dos diferentes termos não foram escritos por simplicidade. Como o interesse nos estudos do crescimento de superfícies está em geral nas propriedades de escala no limite hidrodinâmico, os termos ∇^4 (e de ordem superior) tornam-se desprezíveis em relação a ∇^2 , e podemos escrever finalmente a equação como

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.21)$$

que é conhecida como a equação de Edwards-Wilkinson [20]. O termo $\nu \nabla^2 h$ representa a tensão superficial na interface e o termo $\eta(\vec{x}, t)$ é conhecido como ruído branco. Para se determinar os expoentes de crescimento a partir desta equação estocástica, podemos tomar a sua transformada de Fourier no espaço e no tempo, obter a função de correlação entre alturas e, finalmente, tomar a transformada inversa. Por esse procedimento [1, 20] chega-se aos valores exatos dos expoentes críticos:

$$\alpha = \frac{2-d}{2}; \quad \beta = \frac{2-d}{4}; \quad z = 2 \quad [EW]. \quad (2.22)$$

2.4 Modelo de Deposição Balística

A deposição balística é o modelo mais simples que apresenta um agregado com poros no volume formado. Este modelo inclui correlações entre os vizinhos mais próximos, podendo também apresentar correlações com os vizinhos mais distantes.

Na figura 2.4 representamos esquematicamente a deposição de partículas neste modelo. Partículas são sorteadas para cair aleatoriamente em qualquer posição do substrato, e são agregadas ao sítio que apresenta o primeiro contato com a interface. Dessa forma, ocorre a formação de uma estrutura porosa, com a interface apresentando um crescimento com uma componente tangencial à superfície inicial do substrato.

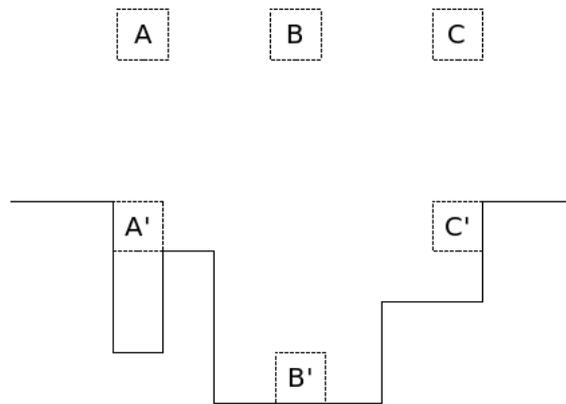


Figura 2.4: Regras para a deposição balística de partículas.

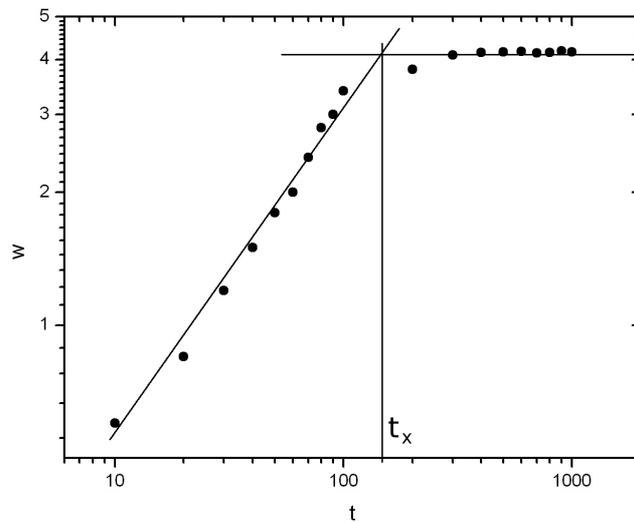


Figura 2.5: Deposição Balística em uma dimensão e $L = 200$.

Esse modelo de crescimento mostra a largura de interface evoluindo com o tempo nos instantes iniciais da deposição, porém exibe saturação da rugosidade após o tempo t_x . A figura 2.5 representa graficamente o resultado de uma simulação numérica para a deposição balística realizada em $(1 + 1)$ dimensões em um substrato linear de tamanho $L = 200$.

Os resultados das simulações numéricas para os expoentes de crescimento do modelo de deposição balística, sugerem os valores $\alpha \approx 0.50$ e $\beta \approx 0.33$ para $d = 1$, com pequenas variações entre os vários trabalhos encontrados na literatura [22].

Os modelos de deposição aleatória e deposição aleatória com relaxação superficial vistos até agora, podem ser descritos por uma equação diferencial estocástica linear e, dessa forma, podemos determinar os seus expoentes de crescimento. Diferentemente desses modelos, o de deposição balística não é um modelo linear, devido à presença de uma componente do crescimento na direção perpendicular a interface. O crescimento lateral desse modelo exige que sua equação diferencial estocástica tenha um termo não linear, que o coloca na classe de modelos não lineares, descritos na próxima seção.

2.5 Equação de Kardar-Parisi-Zhang

Com o intuito de estudar as interfaces formadas por depósitos de vapor em filmes finos, como nos modelos de deposição balística, Kardar, Parisi e Zhang propuseram um tratamento analítico para esse problema, em um trabalho de 1986 [25]. Apresentaram pela primeira vez uma generalização da equação de Edwards e Wilkinson, acrescentando a esta um termo não linear. Muitos trabalhos apresentam abordagens da equação KPZ [3, 23, 24, 26]. De forma similar ao procedimento feito para derivar a equação de EW, utilizando-se de argumentos de simetria, pode-se propor uma equação diferencial estocástica contendo um termo não linear. Essa equação não linear, conhecida como *equação KPZ*, requer métodos aproximativos para ser resolvida, como o grupo de renormalização. Para o caso unidimensional da equação KPZ, podemos determinar os valores exatos dos expoentes de escala α e β . O modelo de deposição balística apresenta em sua regra de construção um crescimento lateral, ou seja, uma partícula é agregada ao substrato no primeiro contato com a interface. Para incluir este crescimento lateral, a figura 2.6 representa o termo δh ao longo da direção de crescimento, bem como o termo $v\delta t$ normal a interface.

A componente na direção do crescimento δh é dada então por:

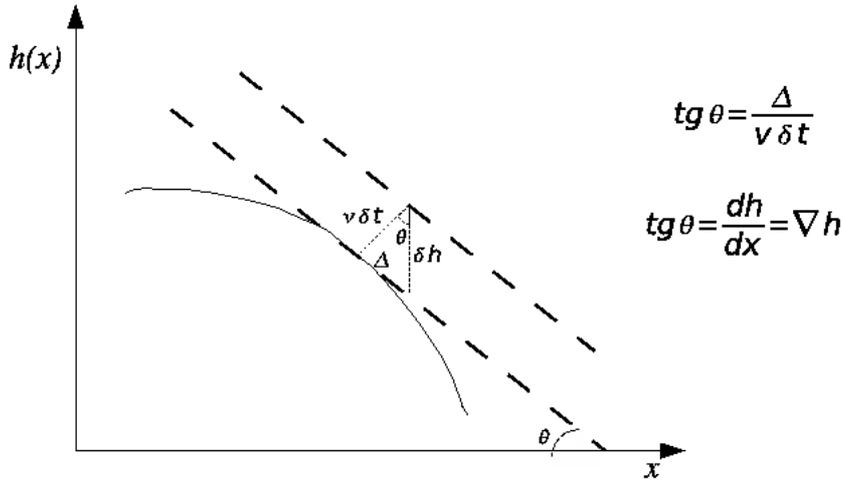


Figura 2.6: Origem do termo não linear na equação de KPZ [1].

$$\delta h = [(v\delta t)^2 + (\Delta)^2]^{\frac{1}{2}} = v\delta t[1 + (\nabla h)^2]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.23)$$

onde $\Delta = v \operatorname{tg}\theta \delta t$. Desde que $|\nabla h| \ll 1$, pode-se expandir até segunda ordem:

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = v + \frac{v}{2}(\nabla h)^2 + \dots, \quad (2.24)$$

onde o termo não linear $(\nabla h)^2$ representa o crescimento lateral da interface. Acrescentando esse termo à equação de EW, temos então:

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.25)$$

conhecida como equação KPZ, onde o primeiro termo descreve a relaxação na interface devido a tensão superficial ν e o último termo representa o ruído, sem correlações no espaço e no tempo.

Esta equação apresenta as mesmas propriedades de simetria discutidas para a equação de EW, com exceção da simetria *up/down*, para a qual a equação KPZ não é invariante. A quebra dessa simetria é devida a existência de uma força F , perpendicular à interface, que privilegia uma direção para o crescimento. De forma geral, o crescimento lateral de interfaces implica em não linearidade e na quebra da simetria *up/down*.

Para se determinar os expoentes de crescimento associados à equação KPZ, o grupo de renormalização é uma ferramenta extremamente útil e utilizada em um grande número de aplicações. Para sistemas unidimensionais, os expoentes de escala associados à equação

KPZ podem ser determinados exatamente. Nesse caso, temos que

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{1}{3}, \quad z = \frac{3}{2}. \quad (2.26)$$

O grupo de renormalização fornece resultado exato para os expoentes de escala apenas para o caso unidimensional. Isto se deve à validade simultânea da invariância Galileana e do teorema de flutuação-dissipação. Mais detalhes sobre a solução exata da equação KPZ em uma dimensão, e indicações dos valores esperados para os expoentes de escala para dimensões superiores, podem ser vistos em [1]. Simulações numéricas de modelos não lineares têm fornecido valores para os expoentes de escala cada vez mais precisos, em função das facilidades computacionais atuais.

Resumimos na tabela 2.1 os valores dos expoentes de escala para os modelos de deposição até aqui apresentados: aleatória, aleatória com relaxação de superfície e balística, bem como suas equações correspondentes.

Modelo de Deposição	Equação Correspondente	Expoentes de Escala
Deposição Aleatória	$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \eta(\vec{x}, t)$	$\beta = \frac{1}{2}$ e α não é definido
Deposição Aleatória com Relaxação Superficial	$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(\vec{x}, t)$ (EW)	$\alpha = \frac{2-d}{2}, \quad \beta = \frac{2-d}{4}, \quad z = 2$
Deposição Balística	$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t)$ (KPZ)	$\alpha = \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{1}{3}, \quad z = \frac{3}{2} \quad (d = 1)$ Para $d > 1$ os expoentes não são conhecidos exatamente

Tabela 2.1: *Expoentes de escala e equações associadas para três modelos de deposição de partículas [1].*

Existe um grande número de fenômenos descritos em termos de uma teoria não-linear, como a que descreve a deposição balística. Modelos que podem gerar volumes porosos [27] têm sido bastante estudados, apresentando pequenas variações em relação ao modelo

de deposição balística padrão e com grande semelhança com sistemas reais, sendo de interesse tanto teórico quanto tecnológico.

2.6 Porosidade no crescimento de superfícies

Grande parte dos modelos de crescimento foram criados originalmente em áreas de física aplicada, motivados pela tentativa de representar processos como o crescimento de colônias de bactérias, cristalização de polímeros, sedimentação de colóides ou mesmo a formação de materiais porosos.

A abordagem que em geral é seguida nesses trabalhos concentra-se nos estudos relativos a interface formada e não no volume criado no substrato. Mas em muitos processos de crescimento de superfícies de interesse tecnológico é também importante se conhecer a morfologia do volume gerado. Propriedades dos materiais como a condutividade térmica, densidade e permeabilidade, dependem diretamente das características morfológicas do volume formado. Também é de interesse teórico estudar estas características morfológicas, principalmente no que se refere à formação de poros na estrutura.

Tassopoulos *et al.* [28] estudaram a microestrutura de depósitos, examinando a porosidade e a distribuição dos tamanhos dos poros. Tarafdar e Roy [29] propuseram um modelo de deposição balística para simular o processo de formação de rochas sedimentárias, sendo que nesse modelo foram depositadas partículas de dois diferentes tamanhos. A inclusão de partículas de tamanho maior que uma unidade de rede introduz correlações entre as colunas adjacentes no agregado formado. Nesse trabalho foram estudadas a porosidade e a natureza fractal do agregado formado, onde a porosidade foi definida como a razão entre o número de sítios não ocupados e o número total de sítios.

Em um outro trabalho, Tarafdar *et al.* [30] estudaram o efeito da rugosidade de superfície nas propriedades do volume formado em meios porosos, onde partículas de dois diferentes tamanhos foram depositadas em um substrato plano. Depositar um pequeno número de partículas de maior tamanho, conforme apresentado pelos autores, forma um agregado altamente poroso, porém com suas partículas totalmente conectadas, o que é uma característica das estruturas estáveis.

Silveira e Reis [27] estudaram as propriedades do volume formado por um modelo bidispersivo de deposição de partículas. Nesse trabalho mostraram que a inserção de um pequeno número de partículas maiores que a célula unitária da rede cria no agregado

poros, que podem percolar por toda a rede. Nesse estudo, mostraram que a porosidade escala com $P \sim F^{1/2}$, onde F representa o percentual de partículas maiores que a unidade de rede.

Geralmente, nos estudos da dinâmica de crescimento de superfícies, são feitas abordagens sobre a dimensão fractal dos agregados formados, buscando-se características universais entre os diferentes modelos e diferentes sistemas, de modo que se possa caracterizar os depósitos formados pelas mais diversas técnicas experimentais. Os resultados recentes na literatura [1, 2, 27] mostram que para os modelos de deposição tipo balística, a dimensão fractal é da ordem dos valores encontrados experimentalmente, onde D_F varia de 2.7 a 2.9.

Baseado nos modelos até aqui apresentados, vemos que vários trabalhos na literatura apresentam uma competição entre os modelos de crescimento, tendo muitas vezes, comportamentos de escala intermediários entre os modelos inicialmente utilizados. Podemos escrever uma lei de escala generalizada para a fusão de dois modelos de crescimento, representando ambas as características, como apresentado por Horowitz *et al.* [16].

Já para alguns modelos de crescimento, observamos ainda que a inclusão de defeitos na rede, pode causar uma quebra completa de simetria, de forma que para esses sistemas, as correlações espaciais deixam de ser importantes [36]. Neste caso, a superfície não apresenta saturação da rugosidade e o expoente de crescimento $\beta = 1$.

3 DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS DE DIFERENTES TAMANHOS EM (1 + 1) DIMENSÕES

3.1 Introdução

Muitos modelos de crescimento têm sido propostos nas últimas décadas como uma tentativa teórica de descrever, ao menos qualitativamente, diversos fenômenos de interesse prático e tecnológico [3, 5, 11, 27, 31, 32, 33, 34, 35, 36]. Modelos com as mais variadas características têm sido estudados por meio de equações contínuas de crescimento e por meio de modelos numéricos discretos. Embora em um grande número de problemas práticos envolvendo crescimento de superfícies e interfaces, os depósitos sejam formados por diferentes tipos de partículas, ainda assim são poucos os trabalhos teóricos que abordam modelos para o crescimento de superfícies com partículas de diferentes formas ou tamanhos [27, 29, 30, 37]. Essa lacuna no estudo do crescimento de superfícies motivou o presente trabalho, onde realizamos um estudo sistemático de agregados formados por partículas de diferentes tamanhos, depositadas em um dado substrato. Também foram considerados depósitos de partículas idênticas cujo tamanho é maior que a unidade do retículo do substrato. Ao longo deste capítulo serão apresentados os modelos propostos, as simulações computacionais realizadas, os resultados obtidos e as discussões correspondentes.

3.2 Descrição do Modelo

O modelo de crescimento proposto nesse trabalho é baseado no modelo puramente aleatório, onde as partículas são depositadas em uma posição aleatoriamente escolhida na rede (linear, de tamanho L) e agregadas na menor altura da interface, como visto no capítulo 2, porém aqui as partículas apresentam uma distribuição de tamanhos. Outra diferença essencial neste trabalho é a possibilidade de uma partícula sorteada não ser

agregada à interface, devido a vínculos geométricos, o que de alguma forma representaria a reflexão de partículas na superfície do agregado. Em todas as simulações foram utilizadas condições de contorno periódicas.

As simulações foram realizadas para dois tipos diferentes de depósitos: em um deles partículas de diferentes tamanhos são misturadas em um mesmo substrato, e no outro caso, a deposição ocorre com partículas idênticas. Para o agregado formado por partículas de diferentes tamanhos, foram depositadas partículas com tamanhos variando de 1 até 9 unidades do parâmetro de rede do substrato, distribuídas em tamanho de acordo com a distribuição de *Poisson*, uma distribuição discreta de probabilidades, com valores inteiros e positivamente definidos.

No modelo de crescimento proposto, a correlação entre os vizinhos é introduzida naturalmente devido a inclusão de partículas de tamanhos grandes. Já no modelo de deposição aleatória, com partículas de tamanho igual a uma unidade de rede, não há correlação entre os vizinhos, enquanto que no modelo de deposição balística, existe correlação entre os primeiros vizinhos da rede.

Poderíamos ter escolhido para este trabalho outras distribuições para a seleção dos tamanhos das partículas, como por exemplo, uma distribuição gaussiana. A motivação da escolha da distribuição de *Poisson* se deve a características experimentais, tentando dar ao modelo aqui proposto um caráter um pouco mais realista. Em várias superfícies formadas pela deposição de partículas, temos que as partículas em questão podem ter diferentes formas e tamanhos. A formação de sedimentos rochosos ou agregados formados pela deposição de fuligem são exemplos de superfícies formadas por partículas das mais variadas formas e tamanhos.

Em trabalhos recentes, onde o foco do estudo foi o depósito formado pela deposição de partículas de fuligem [33, 34, 38], o tamanho das partículas em questão varia de forma bastante acentuada, com duas ou mais ordens de grandeza no tamanho das partículas que formam o agregado.

A análise de imagens de várias amostras de depósitos reais, feitas por meio de microscopia eletrônica de varredura, realizadas no Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas (LMPT/UFSC), mostram que o tamanho das partículas desse tipo de depósito segue aproximadamente uma distribuição como a de *Poisson*. Uma imagem da superfície de um depósito de partículas de fuligem, obtida por microscopia eletrônica,

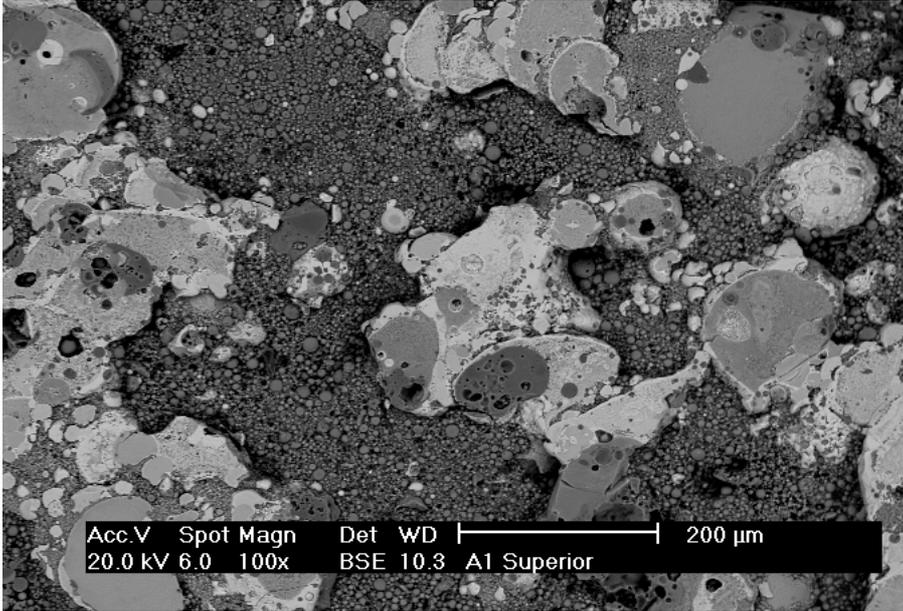


Figura 3.1: Imagem feita por microscopia eletrônica da superfície de um depósito formado por partículas de fuligem.

pode ser vista na figura 3.1.

De forma a simplificar nosso modelo, mas mantendo certas características que tentam reproduzir um depósito real, utilizamos a distribuição de *Poisson* para a escolha dos tamanhos das partículas que são lançadas sobre o depósito. Porém, dadas as dificuldades computacionais de se trabalhar com tamanhos muito grandes, fizemos com que as partículas variassem seu tamanho apenas de 1 a 9 unidades do parâmetro de rede.

Ainda há muitas outras características que podem ser levadas em consideração ao se tentar representar mais realisticamente um processo de formação de depósitos desse tipo, como a temperatura ou o ângulo de deposição das partículas. Essas características não são levadas em consideração no modelo proposto.

A probabilidade de uma partícula de tamanho n ser sorteada é dada por:

$$P(n, x) = \frac{x^n e^{-x}}{n!}, \quad (3.1)$$

onde x é o tamanho médio das partículas. Em nossas simulações, o valor médio utilizado foi de 5, enquanto que os tamanhos das partículas variam de 1 a 9. A distribuição de partículas sorteadas em nossas simulações para a tentativa de deposição, está representada na figura 3.2, com o valor médio de tamanho igual a 5 unidades da rede.

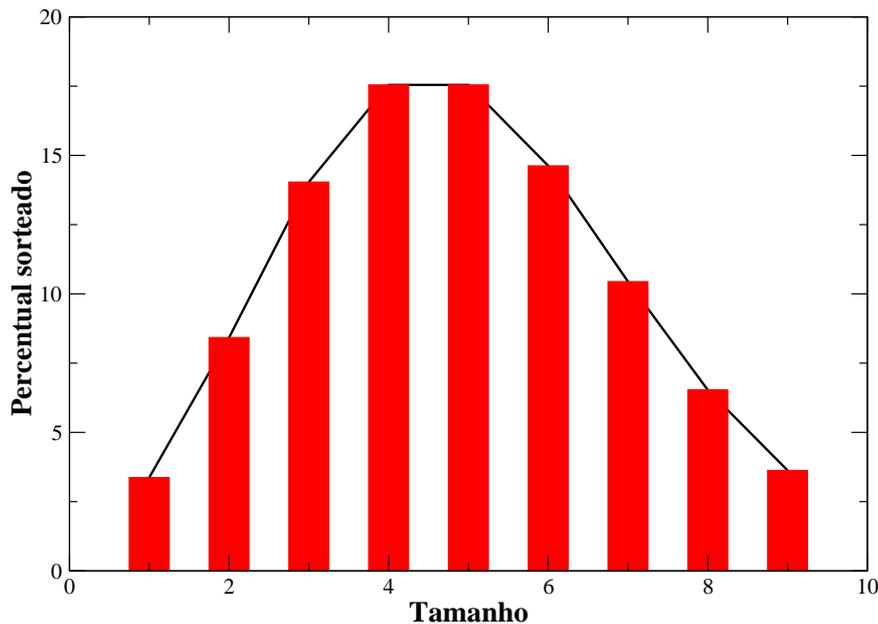


Figura 3.2: Distribuição dos tamanhos das partículas sorteadas, baseadas na distribuição de Poisson, com valor médio igual 5.

Foi necessário modificarmos a distribuição de *Poisson*, tomando uma “normalização” e limitando a mesma. Como estamos depositando partículas de tamanhos bem definidos, precisamos ter também limites bem determinados para a distribuição, como por exemplo, os seus valores máximo e mínimo. De certa forma, fazemos uma correspondência entre as distribuições aleatória e de *Poisson* modificada, e tomamos os valores de 1 e 9 como os valores mínimo e máximo, respectivamente. Em nossas simulações, sorteamos aleatoriamente um número entre zero e um, e associamos esse número com um dado tamanho de partícula, obtido da distribuição de *Poisson* modificada. Por exemplo, a chance de escolhermos uma partícula com o tamanho 5, é cerca de seis vezes maior que a chance de escolhermos uma partícula com o tamanho 1.

Para os agregados formados por partículas idênticas, consideramos partículas de tamanhos 2 a 8 unidades do parâmetro de rede do substrato. Neste capítulo, as simulações são realizadas em $(1 + 1)$ dimensões e as partículas são representadas por segmentos de tamanho variável e de altura fixa, igual a uma unidade de rede.

O processo de deposição de partículas de diferentes tamanhos é então realizado da seguinte forma:

1. Sorteia-se aleatoriamente uma posição na rede, dentre as L posições possíveis, onde

desejamos depositar a partícula.

2. O tamanho da partícula é então sorteado, baseado numa distribuição de probabilidades de *Poisson* modificada. São sorteados tamanhos que variam de 1 a 9 unidades do parâmetro de rede.
3. Em seguida, verifica-se a altura na posição sorteada, e se em torno desta posição e altura, há espaço disponível para se depositar uma nova partícula, de tamanho definido no passo anterior.
4. Havendo espaço disponível, a nova partícula é agregada em torno da posição sorteada na rede e as alturas nessas posições são incrementadas de uma unidade.
5. Caso não haja espaço disponível para a deposição da partícula, a mesma é rejeitada e não é agregada à superfície.
6. Retorna-se ao passo inicial para a escolha de nova posição na rede e tentativa de depositar novas partículas. Esse processo é repetido até a simulação atingir o número de passos de Monte Carlo que se deseja.

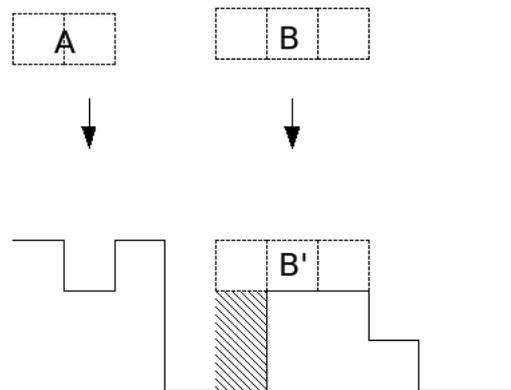


Figura 3.3: *Regras de deposição de partículas no modelo. A linha cheia representa a interface da superfície, enquanto que as partículas A e B estão sendo depositadas. A partícula A é rejeitada enquanto que a B é adicionada ao substrato, criando uma zona de “sombra”, o que dá origem aos poros no volume.*

A figura 3.3 mostra detalhes das regras de crescimento da superfície. A linha cheia inferior representa a interface formada, e as partículas a serem depositadas são representadas pelas linhas tracejadas, rotuladas de **A** e **B**. A posição na rede onde ocorre a

tentativa de adição ao substrato é representada pelas setas, e verificamos se nos sítios ao seu redor há espaço suficiente para agregar a partícula em questão. Para partículas de tamanho unitário, sempre haverá espaço disponível e a mesma sempre será agregada ao substrato. Na figura 3.3, a partícula **A** não será adicionada ao substrato, pois não há espaço disponível nos sítios ao redor da posição aleatoriamente sorteada na rede, e assim ela é descartada. Já a partícula **B** será adicionada ao substrato, criando ainda uma região de “sombra”, o que dá origem aos poros no volume do depósito.

A adição de partículas de tamanho maior que a unidade do espaçamento do substrato, aliado às regras da deposição aleatória, criam vacâncias no depósito, gerando um volume poroso, como pode ser observado pela região sombreada na figura. Nessa região, nenhuma outra partícula poderá ser adicionada.

Em um trabalho recente com deposição de partículas de dois tamanhos diferentes, uma delas igual ao espaçamento da rede e outra com o dobro do tamanho da primeira, Aarão Reis e Silveira [27] mostraram que a inclusão de um pequeno percentual de partículas de maior tamanho, cria no depósito poros muito grandes, que percolam por toda a rede e podem criar uma estrutura instável. Já no modelo de crescimento apresentado neste trabalho, a deposição segue o modelo aleatório, porém apresenta também certas características do modelo balístico, como será visto adiante.

Nesta dissertação também realizamos estudos depositando partículas de um mesmo tamanho sobre o substrato. O processo de crescimento é similar ao exibido pela deposição de partículas de diferentes tamanhos, com a diferença de não ser necessário sortear agora os tamanhos das partículas, uma vez que já são definidos previamente para cada simulação a ser realizada.

A figura 3.4 representa o crescimento da superfície pela deposição de partículas de tamanho 4. A partícula rotulada por **A** será rejeitada, pois não há espaço disponível em torno da posição sorteada, enquanto a partícula rotulada por **B** é agregada e cria duas zonas de sombra sob si, onde mais nenhuma outra partícula poderá ser adicionada.

De forma geral, o algoritmo usado para realizar todas as simulações neste trabalho é descrito pelos seguintes passos:

1. Condições iniciais: Definem-se as condições iniciais, como tamanho de rede, tipos de partículas a serem depositadas (de diferentes tamanhos ou partículas idênticas), e número de passos de Monte Carlo que se deseja realizar.

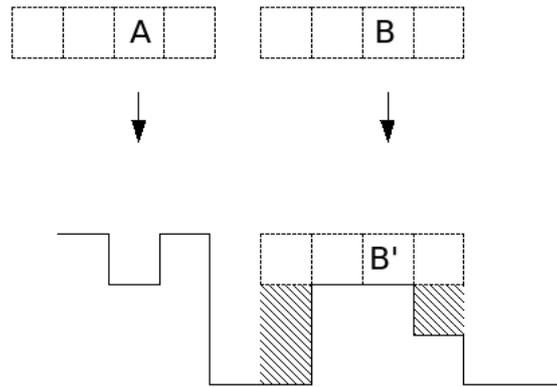


Figura 3.4: *Regras de deposição de partículas idênticas. Neste caso, são depositadas partículas de tamanho 4 apenas. A partícula A é rejeitada enquanto que a partícula B é agregada, criando agora duas zonas distintas de “sombra”.*

2. Sorteia-se aleatoriamente um sítio na rede, onde tentaremos adicionar a partícula.
3. Realizamos o procedimento de deposição da partícula, como apresentado anteriormente, baseado nas condições iniciais (se para partículas idênticas ou para partículas de diferentes tamanhos). Aqui as alturas ao redor do sítio sorteado sempre são incrementadas de uma unidade de rede, caso a partícula em questão seja adicionada.
4. Incrementa-se o número de passos de Monte Carlo, lembrando que definimos um passo de Monte Carlo (MCS) como a tentativa de se depositar L partículas na rede.
5. Efetuamos os cálculos da rugosidade de superfície para cada MCS.
6. Efetuamos os cálculos da porosidade para cada MCS.
7. Quando se atingir o número de MCS definido no ítem 1, finalizamos a simulação.

As simulações realizadas para agregados formados pela deposição de partículas de diferentes tamanhos (1 a 9 unidades do parâmetro de rede), tiveram substratos de tamanhos $L = 128, 256, 512$ e 1024 . Já para as partículas idênticas, foram realizadas simulações para partículas de tamanhos 2, 4, 6 e 8, em substratos de tamanho linear dos mesmos tamanhos que realizado anteriormente, ambas em $(1 + 1)$ dimensões. Para os gráficos apresentados na próxima seção, foram consideradas simulações para diversas amostras, e dessa forma os gráficos correspondem a médias sobre todas elas. Para as simulações realizadas em $(1 + 1)$ dimensões, os resultados apresentados representam médias sobre, em geral, 150 amostras diferentes.

3.3 Determinação dos Expoentes de Escala

No estudo da morfologia de superfícies e interfaces, temos um especial interesse em determinar os expoentes de escala que representam as características físicas mais essenciais dos modelos. Outra abordagem comumente usada é o estudo da geometria fractal, por meio da determinação da dimensão fractal dos agregados, bem como sua relação com os conceitos de escala e com as leis de potência usadas para descrever a morfologia do crescimento de superfícies [39].

Neste trabalho buscamos, por meio de simulações de Monte Carlo, determinar os expoentes de escala para os modelos aqui propostos, e encontrar a classe de universalidade a qual pertence o modelo estudado. Além de estudar a rugosidade de superfície, focalizamos também nossa atenção na criação de poros em todo o depósito, e o seu comportamento em função de parâmetros como tamanho de partículas (N), tamanho de rede (L) e o tempo (MCS).

Como visto no capítulo 2, a rugosidade de superfície é definida através da flutuação quadrática média das alturas. O valor da rugosidade de superfície ω é proporcional a t^β para tempos curtos e proporcional a L^α , para tempos longos.

Assim, devemos obter gráficos do logaritmo da rugosidade de superfície em função do logaritmo do tempo (definido como os passos de Monte Carlo - MCS) e calcular o expoente de crescimento β . O comportamento da largura de interface em função do tamanho das redes onde realizamos as simulações, nos fornece os valores do expoente de saturação α , e de posse desses dois expoentes, determinamos o expoente dinâmico z , por meio da relação 2.6.

Outra forma de determinar os valores dos expoentes de crescimento é através do colapso dos valores da rugosidade para diferentes tamanhos de substratos. Por meio de uma relação de escala, Family e Vicsek [15] mostraram que podemos representar diferentes tamanhos de rede em um mesmo gráfico, e dessa forma, também encontrar os expoentes α e z .

A relação de escala de *Family-Vicsek*

$$\omega(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) \quad (3.2)$$

define dois diferentes comportamentos, dependentes do valor do argumento da função f . Quando a razão $\frac{t}{L^z}$ apresenta pequenos valores, a função de escala cresce segundo uma

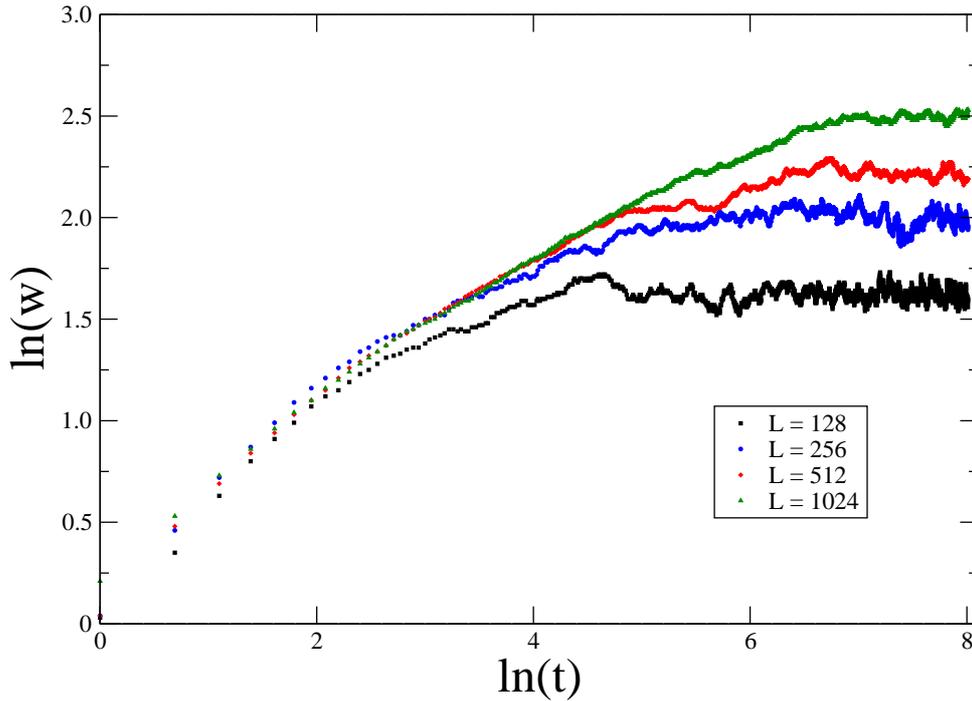


Figura 3.5: $\ln(\omega)$ versus $\ln(t)$ para a deposição de partículas de diferentes tamanhos em substratos de tamanhos $L = 128, 256, 512$ e 1024 .

lei de potência. Já quando consideramos tempos longos, a função f é constante e a largura da interface satura.

Dessa maneira, podemos representar graficamente $\frac{\omega}{L^\alpha}$ versus $\frac{t}{L^z}$ e encontramos o valor do expoente de crescimento β , por meio da equação 2.6.

3.3.1 Resultados para deposição de partículas de diferentes tamanhos

Inicialmente apresentamos os resultados para as simulações onde foram depositadas partículas de diferentes tamanhos em um mesmo substrato. Nesse estudo, depositamos partículas de tamanhos variando de 1 a 9 unidades do parâmetro de rede, para quatro diferentes dimensões do substrato. A figura 3.5 nos mostra o comportamento do logaritmo da rugosidade de superfície em função do logaritmo do tempo para as quatro redes. Como pode ser observado nos gráficos, o valor de saturação da rugosidade depende tanto do tamanho da rede como do tempo. A saturação da rugosidade de superfície é um fenômeno que deve ser associado à saturação do comprimento de correlação transversal, devido ao tamanho finito do sistema.

Observando mais detalhadamente os resultados exibidos na figura 3.5, podemos notar três comportamentos distintos, exemplificados pela figura 3.6. Para os tempos iniciais

do crescimento da superfície, a rugosidade cresce mais significativamente até um tempo definido como o *tempo de crossover* (t_c). Após t_c , a rugosidade superficial apresenta um outro comportamento, agora com um crescimento mais suave até entrar em um regime de saturação. Definimos o tempo que indica a mudança deste regime como o *tempo de saturação* (t_x). Outra característica que podemos observar nessa figura, é a grande flutuação dos valores de rugosidade. Embora realizamos médias sobre várias amostras, essas flutuações são características de sistemas pequenos, e dessa forma, não diminuem consideravelmente para mais amostras simuladas.

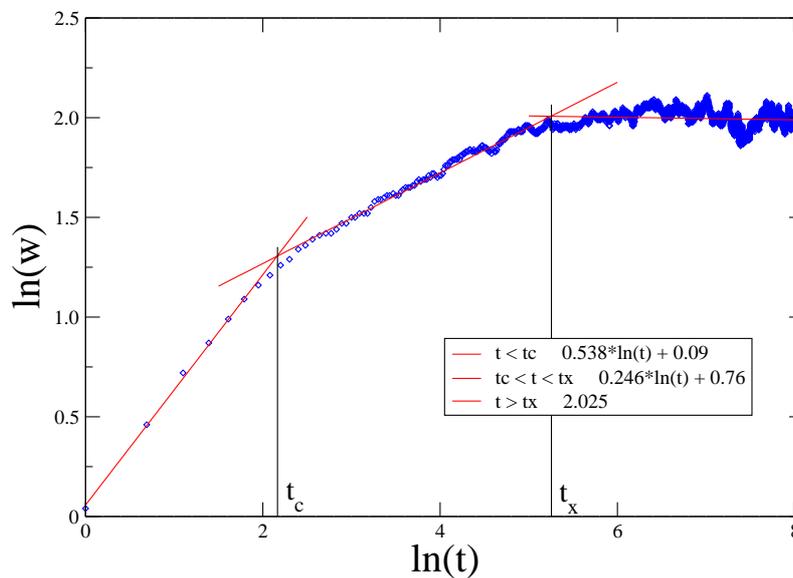


Figura 3.6: $\ln(\omega)$ versus $\ln(t)$ para a deposição de partículas de tamanhos entre 1 e 9, em uma rede $L = 256$. O quadro mostra os valores dos ajustes lineares para tempos inferiores ao tempo de “crossover” (t_c), entre t_c e o tempo de saturação (t_x) e para o valor de saturação, maiores que t_x .

As retas no gráfico são os ajustes lineares para os três diferentes comportamentos, e os tempos t_c e t_x também estão representados. No quadro anexo ao gráfico apresentamos os valores numéricos para esses ajustes lineares. A figura 3.6 representa o resultado médio de 150 amostras diferentes.

Desta forma, vemos que o depósito apresenta dois diferentes regimes de crescimento, exibindo assim dois expoentes característicos de crescimento: β_1 e β_2 . Para os tempos iniciais, o crescimento se comporta basicamente como uma deposição aleatória, visto que o modelo é baseado em um crescimento aleatório e as partículas estão pouco correlaci-

onadas. Somente quando mais partículas estão depositadas é que a correlação torna-se importante, possibilitando a formação de um depósito poroso. Quando isso ocorre, temos uma mudança no comportamento, que pode ser caracterizada pelo valor encontrado em nossas simulações para o expoente de crescimento β_2 .

Para o expoente β_1 obtemos valores em torno de 0.5, muito próximos ao valor $\frac{1}{2}$, que é o valor exato para a deposição aleatória em qualquer dimensão. Já para o segundo expoente de crescimento, os valores encontrados variam de $\beta_2 \approx 0.205$ a $\beta_2 \approx 0.297$.

Os valores dos expoentes β_1 , β_2 , α e z , bem como os valores de saturação da rugosidade superficial estão indicados na tabela 3.1 para redes de dimensões diferentes. Para a rede com $L = 1024$ foram realizadas 100 simulações diferentes para obtermos esses valores médios, enquanto que para as demais, os resultados representam médias sobre 150 amostras. As flutuações em torno do valor de saturação da rugosidade diminuem pouco quando tomamos médias sobre mais amostras, de modo que para um resultado numérico mais preciso, seria ainda necessário considerar muito mais amostras.

Rede (L)	β_1	β_2	$\ln(w_{sat})$	z	α
128	0.51 ± 0.02	0.20 ± 0.07	1.66 ± 0.01	1.9 ± 0.4	0.38 ± 0.03
256	0.54 ± 0.02	0.25 ± 0.05	2.02 ± 0.01	1.6 ± 0.2	
512	0.51 ± 0.02	0.29 ± 0.01	2.20 ± 0.01	1.29 ± 0.09	
1024	0.46 ± 0.03	0.29 ± 0.01	2.49 ± 0.01	1.29 ± 0.09	

Tabela 3.1: *Expoentes de crescimento, valor de saturação da rugosidade, expoente dinâmico e de saturação para depósitos formados por partículas de diferentes tamanhos.*

A figura 3.7 mostra os resultados das médias sobre todas as amostras utilizadas para se obter os valores apresentados na tabela 3.1, para as diferentes redes estudadas. Na figura 3.8 vemos o gráfico dos valores do logaritmo da rugosidade de superfície, no regime de saturação, contra o logaritmo do tamanho da rede, a partir do qual avaliamos o expoente de saturação da rugosidade α . O expoente dinâmico é calculado pela relação de escala obtida por Family e Vicsek, como apresentado na equação 2.6.

Observamos ainda que para as menores redes, a rugosidade de superfície atinge um valor estacionário para tempos bem inferiores que para as redes maiores.

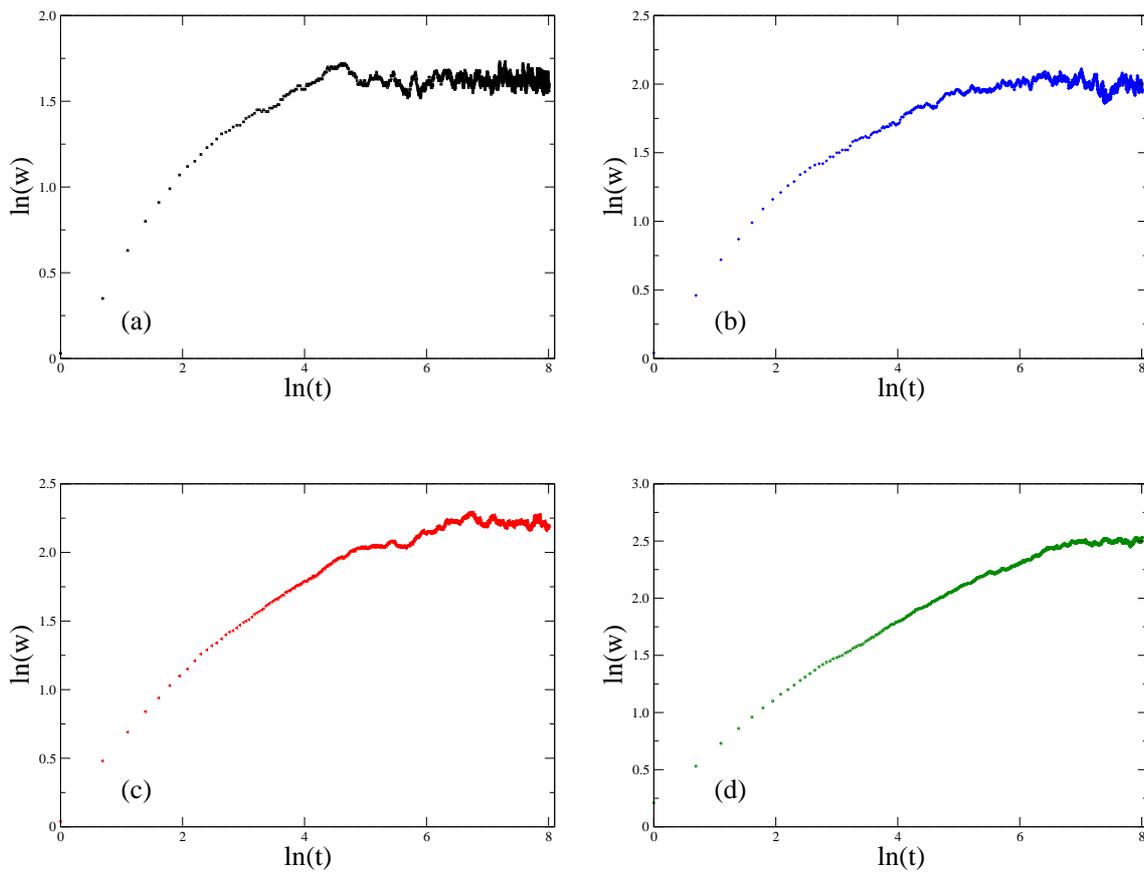


Figura 3.7: Rugosidade de superfície para a deposição de partículas de diferentes tamanhos. O gráfico (a) representa uma rede com $L = 128$, (b) $L = 256$, (c) $L = 512$ e (d) $L = 1024$.

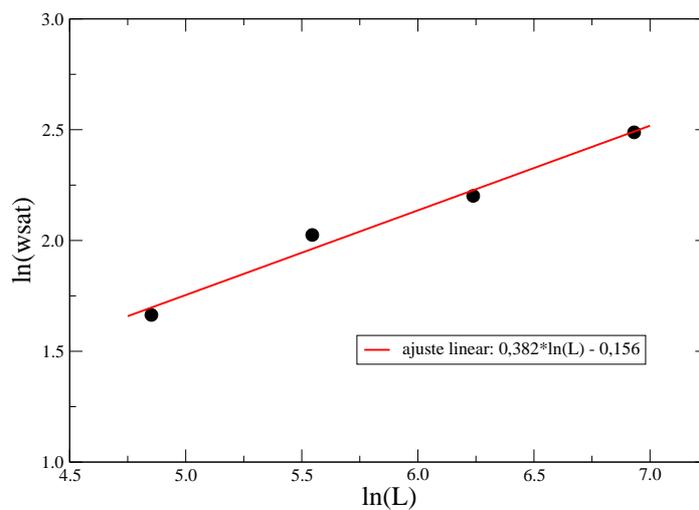


Figura 3.8: Cálculo do expoente de saturação (α) para a deposição de partículas de diferentes tamanhos.

3.3.2 Resultados para a deposição de partículas idênticas

No estudo do crescimento de superfícies onde as partículas que formam o substrato têm todas o mesmo tamanho (porém são maiores que o parâmetro de rede), são encontrados alguns resultados diferentes daqueles observados para a deposição de uma distribuição de partículas. Neste caso observamos claramente uma dependência da rugosidade de superfície com o tamanho das partículas que formam o depósito, além de sua usual dependência com o tamanho da rede.

Na figura 3.10 podemos observar que o tempo necessário para o sistema atingir o estado estacionário varia com a dimensão da partícula que está sendo depositada na rede, lembrando que nessa figura todos os gráficos representam o logaritmo da rugosidade de superfície para uma mesma rede, no caso $L = 128$. O valor de saturação da rugosidade decresce com o aumento do tamanho das partículas depositadas.

Isso se deve ao fato de a saturação da rugosidade de superfície ser uma propriedade associada às correlações espaciais do sistema. Mesmo utilizando condições de contorno periódicas, que tentam simular um sistema de tamanho infinito, na prática isso é impossível, e efeitos relacionados ao tamanho finito do sistema são observados. Para uma rede de tamanho $L = 128$, o gráfico (a) da figura 3.10 representa um depósito formado por partículas de tamanho 2, ou seja, um pouco menor que 2% do tamanho da rede. Para o gráfico (d) da mesma figura, onde foram depositadas partículas de tamanho 8, cada partícula representa agora um pouco mais de 6% do tamanho da rede. Desse modo, o sistema atinge o valor de saturação da rugosidade para tempos bem menores. Uma coletânea de valores associados à deposição de partículas idênticas é mostrada na tabela 3.2.

De forma a ilustrar o crescimento de superfície, a figura 3.9 mostra um depósito em um substrato linear de tamanho 1024 após atingir-se o regime de saturação. Podemos observar que a superfície, mesmo após atingir o regime de saturação, é ainda bastante rugosa.

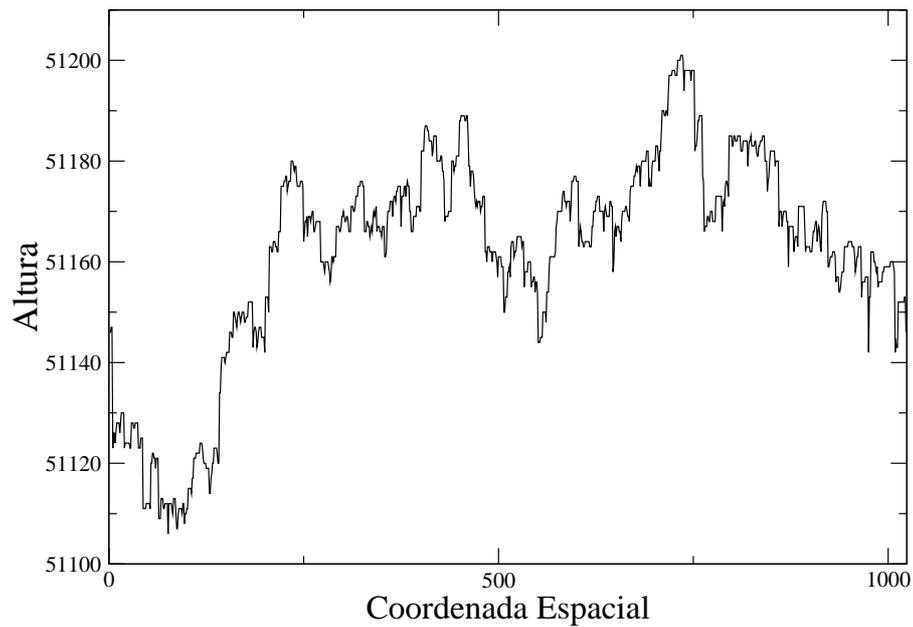


Figura 3.9: *Deposição de partículas de tamanho 4 em um substrato linear unidimensional.*

Tamanho da Partícula (N)	β_1	β_2	$\ln(w_{sat})$	z
2	0.54 ± 0.05	0.31 ± 0.01	2.32 ± 0.01	1.46 ± 0.07
4	0.52 ± 0.02	0.23 ± 0.01	1.90 ± 0.02	1.98 ± 0.01
6	0.53 ± 0.02	0.31 ± 0.01	1.70 ± 0.05	1.49 ± 0.01
8	0.54 ± 0.03	0.23 ± 0.03	1.56 ± 0.02	2.0 ± 0.1

Tabela 3.2: *Expoentes de crescimento β_1 , β_2 , valor de saturação da rugosidade, e expoente dinâmico para uma rede de tamanho $L = 128$ e depósitos formados por partículas de tamanhos de 2 a 8.*

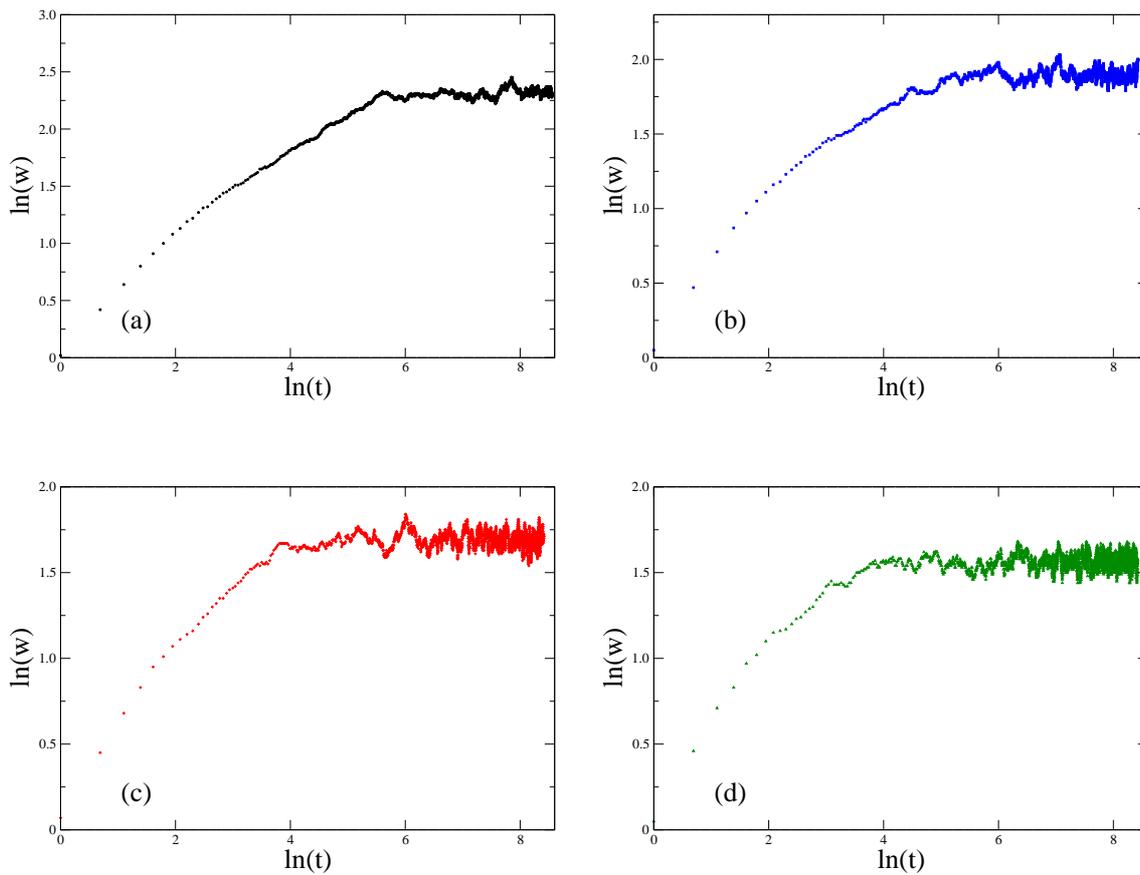


Figura 3.10: *Rugosidade de superfície para a deposição de partículas idênticas, em uma rede com $L = 128$. Os agregados são formados por partículas de tamanho 2 (a), tamanho 4 (b), tamanho 6 (c) e tamanho 8 (d).*

Da mesma forma, para as simulações realizadas para redes maiores, nossos resultados mostram um comportamento similar ao encontrado para $L = 128$. A figura 3.11 e a tabela 3.3 mostram os resultados encontrados para $L = 256$. Aqui vemos claramente que o valor de saturação da rugosidade de superfície decresce para depósitos formados por partículas maiores.

Os mesmos resultados qualitativos são observados nas figuras 3.12 e 3.13, que representam a evolução temporal da rugosidade de superfície para redes de tamanhos 512 e 1024, respectivamente. Nas tabelas 3.4 e 3.5, resumimos os valores determinados para os expoentes de crescimento para as redes de tamanhos 512 e 1024, respectivamente.

De posse dos valores de saturação da rugosidade, podemos estimar o expoente de saturação α para os depósitos formados por partículas idênticas. A figura 3.14 mostra os gráficos que permitem determinar o expoente α para agregados formados por partículas de tamanhos 2, 4, 6 e 8; seus valores estão apresentados na tabela 3.6. Apesar dos resultados obtidos para o expoente de saturação da rugosidade apresentarem uma boa concordância entre si, eles não são aqueles previstos para as classes de universalidade mais conhecidas, seja ela KPZ (que apresenta $\alpha = \frac{1}{2}$) ou EW (que também apresenta $\alpha = \frac{1}{2}$). Lembramos, que em nosso modelo, a deposição é do tipo aleatória, onde a rugosidade de superfície não apresenta saturação, e α não é definido para depósitos formados por partículas de tamanho unitário.

Acreditamos que o modelo estudado não se enquadra propriamente nessas classes de universalidade. Nos instantes iniciais de deposição, ele exibe um comportamento puramente aleatório, ou seja, o sistema não está ainda correlacionado, não há uma grande rejeição de partículas e o volume formado apresenta uma porosidade ainda baixa. Portanto, nessa região, o comportamento é aproximadamente o previsto pelo modelo de deposição puramente aleatória.

Após o tempo de *crossover*, que depende do tamanho da rede, o modelo apresenta um comportamento que se aproxima daquele conhecido para um depósito balístico. A interface apresenta um crescimento lateral devido à formação de um agregado com volume poroso. Os resultados numéricos para os expoentes não são exatamente aqueles do modelo KPZ, visto que há outras características em nosso modelo de deposição que não são usualmente inseridas no modelo de deposição balística, como por exemplo, a possibilidade de que partículas não sejam agregadas, sugerindo uma reflexão das mesmas.

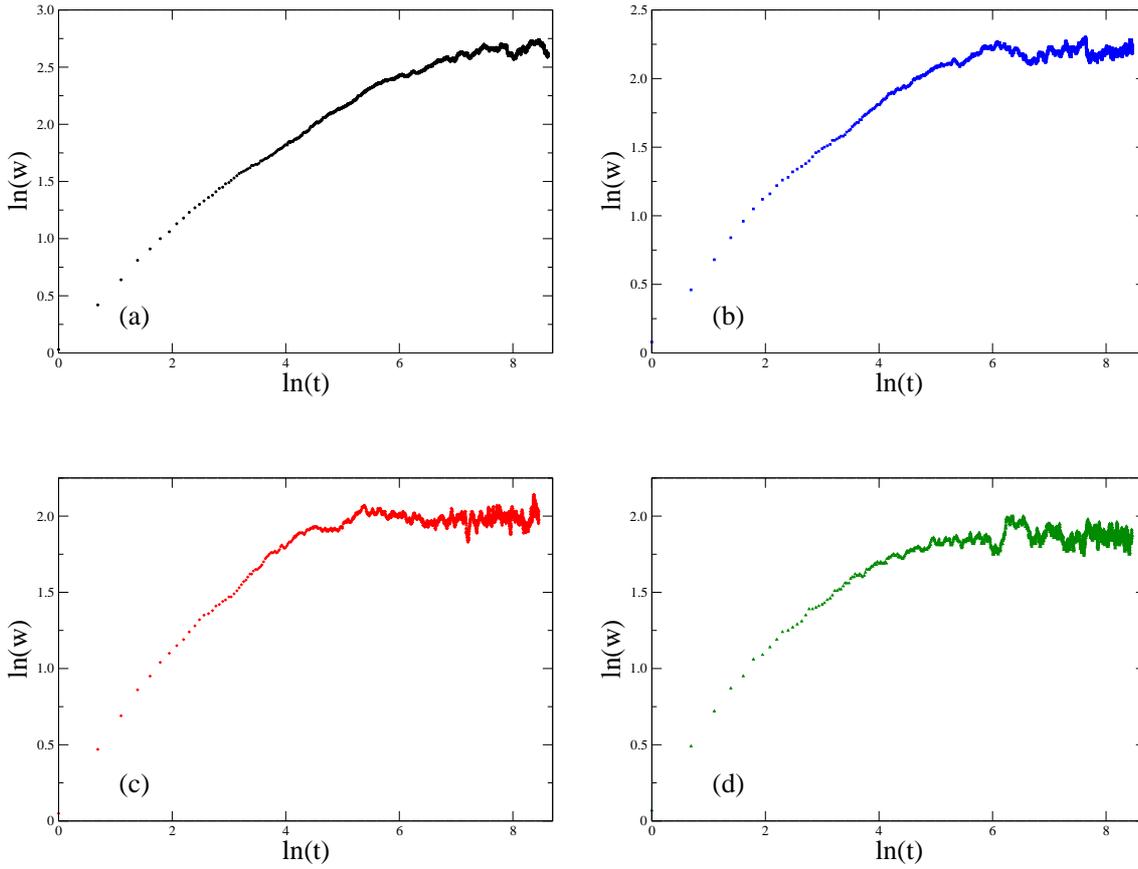


Figura 3.11: *Rugosidade de superfície para a deposição de partículas idênticas, em uma rede com $L = 256$. Agregado formado por partículas de tamanho 2 (a), tamanho 4 (b), tamanho 6 (c) e tamanho 8 (d).*

Tamanho da Partícula (N)	β_1	β_2	$\ln(w_{sat})$	z
2	0.53 ± 0.04	0.31 ± 0.01	2.66 ± 0.01	1.45 ± 0.07
4	0.54 ± 0.03	0.28 ± 0.02	2.20 ± 0.01	1.65 ± 0.07
6	0.54 ± 0.01	0.31 ± 0.01	1.97 ± 0.01	1.48 ± 0.05
8	0.55 ± 0.03	0.22 ± 0.03	1.88 ± 0.02	2.0 ± 0.1

Tabela 3.3: *Expoentes de crescimento β_1 , β_2 , valor de saturação da rugosidade, e expoente dinâmico para uma rede de tamanho $L = 256$ e depósito formado por partículas de tamanhos de 2 a 8.*

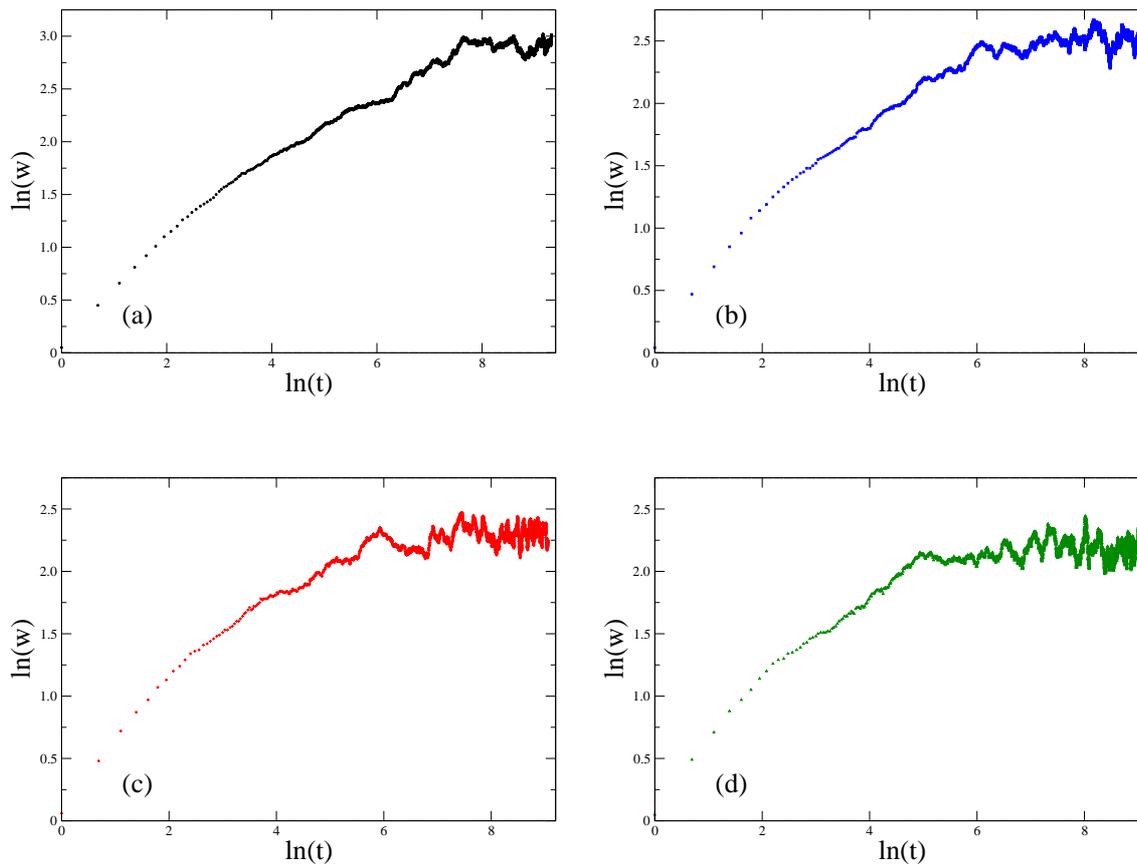


Figura 3.12: *Rugosidade de superfície para a deposição de partículas idênticas, em uma rede com $L = 512$. Agregado formado por partículas de tamanho 2 (a), tamanho 4 (b), tamanho 6 (c) e tamanho 8 (d).*

Tamanho da Partícula (N)	β_1	β_2	$\ln(w_{sat})$	z
2	0.53 ± 0.03	0.28 ± 0.02	2.90 ± 0.01	1.6 ± 0.1
4	0.57 ± 0.03	0.30 ± 0.01	2.52 ± 0.01	1.52 ± 0.03
6	0.55 ± 0.01	0.26 ± 0.04	2.32 ± 0.01	1.7 ± 0.1
8	0.54 ± 0.03	0.32 ± 0.01	2.18 ± 0.02	1.4 ± 0.3

Tabela 3.4: *Expoentes de crescimento β_1 , β_2 , valor de saturação da rugosidade, e expoente dinâmico para uma rede de tamanho $L = 512$ e depósito formado por partículas de tamanhos de 2 a 8.*

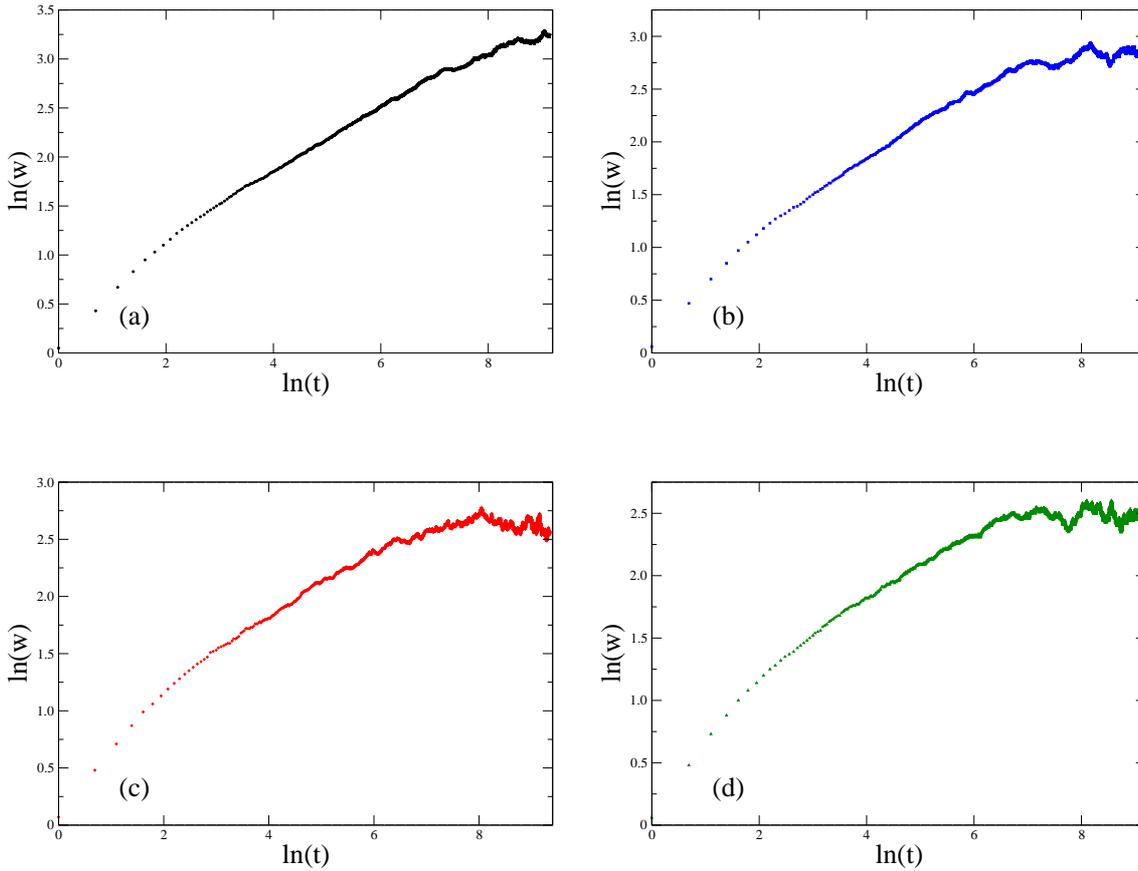


Figura 3.13: *Rugosidade de superfície para a deposição de partículas idênticas, em uma rede com $L = 1024$. Agregado formado por partículas de tamanho 2 (a), tamanho 4 (b), tamanho 6 (c) e tamanho 8 (d).*

Tamanho da Partícula (N)	β_1	β_2	$\ln(w_{sat})$	z
2	0.55 ± 0.05	0.32 ± 0.03	3.29 ± 0.01	1.4 ± 0.1
4	0.55 ± 0.03	0.32 ± 0.02	2.86 ± 0.01	1.43 ± 0.06
6	0.56 ± 0.02	0.27 ± 0.03	2.65 ± 0.02	1.7 ± 0.1
8	0.57 ± 0.04	0.25 ± 0.01	2.51 ± 0.02	1.79 ± 0.02

Tabela 3.5: *Expoentes de crescimento β_1 , β_2 , valor de saturação da rugosidade, e expoente dinâmico para uma rede de tamanho $L = 1024$ e depósito formado por partículas de tamanhos de 2 a 8.*

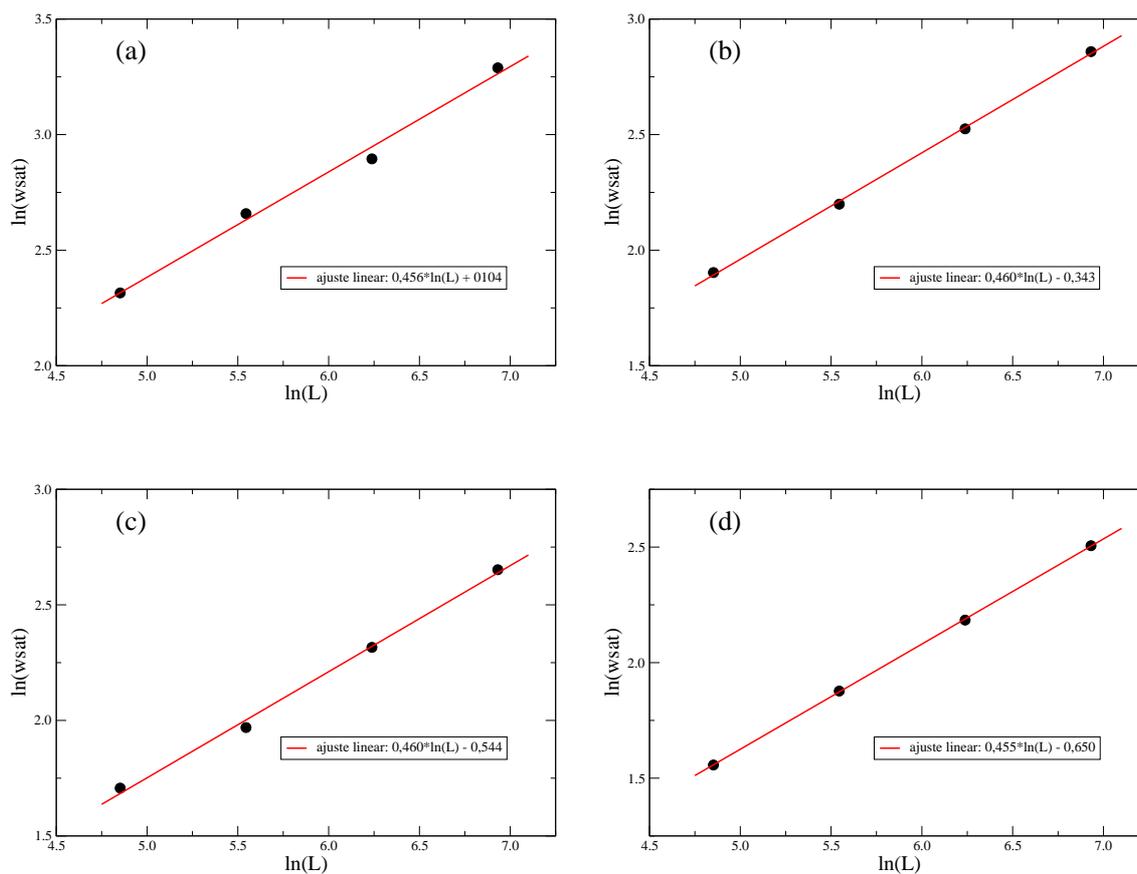


Figura 3.14: Resultados para o expoente da saturação da rugosidade α para (a) partículas de tamanho 2, (b) 4, (c) 6 e (d) 8.

Tamanho da Partícula (N)	Expoente de Saturação α
2	0.46 ± 0.03
4	0.46 ± 0.01
6	0.46 ± 0.02
8	0.45 ± 0.01

Tabela 3.6: Valores dos expoentes de saturação da rugosidade α para depósitos formados por partículas de tamanhos de 2 a 8.

3.4 Estudo da Porosidade

Outro objetivo deste trabalho foi estudar a porosidade formada devido à deposição de partículas de diferentes tamanhos para diversos substratos unidimensionais. Determinamos a evolução temporal da porosidade, para diferentes tamanhos de rede e partículas.

Poucos são os trabalhos conhecidos na literatura que apresentam estudos acerca do volume formado pela deposição de partículas. Tassoupoulos *et al.* [28] apresentaram um estudo da porosidade em depósitos formados pela deposição de partículas em sítios ativos do agregado. Tarafdar *et al.* [30] consideraram um modelo de deposição de partículas bi-dispersivo, porém não deram grande atenção a porosidade formada. Aarão Reis e Silveira [27] consideraram um modelo bidispersivo com deposição balística de partículas. Determinaram a dimensão fractal e as propriedades de escala da estrutura porosa formada, em função da razão das concentrações das duas espécies depositadas.

Neste trabalho, apresentamos um estudo da porosidade formada nos depósitos devido à deposição de partículas de diferentes tamanhos sobre o substrato. Estudamos o seu comportamento em função dos tamanhos do substrato e partículas. Como veremos a seguir, notamos claramente um comportamento de saturação da porosidade já nos tempos iniciais de deposição, e uma forte dependência com o tamanho N das partículas.

3.4.1 Resultados para deposição de partículas de diferentes tamanhos

Em relação ao depósito formado por partículas de diferentes tamanhos, estudamos os depósitos para diferentes tamanhos de rede, depositando partículas com dimensões de 1 a 9. Ao analisar a evolução temporal da porosidade, observamos um comportamento atípico, pois não notamos nenhuma variação significativa, no seu valor de saturação em função do tamanho da rede onde as partículas são depositadas. Definimos a porosidade como a razão entre o número de sítios ocupados por partículas e o número total de sítios, medido a cada passo de Monte Carlo. Nossos resultados mostram que a porosidade cresce muito rapidamente nos tempos iniciais e que logo atinge um valor estacionário, independentemente do tamanho da rede em questão.

Nas figuras 3.15 e 3.16 observamos o comportamento da porosidade em função do tempo. Para os diferentes tamanhos de substratos onde partículas selecionadas de uma distribuição de *Poisson* modificada são depositadas, o valor encontrado para a saturação da porosidade foi praticamente o mesmo. Como será mostrado na próxima seção deste capítulo, esse valor depende somente do tamanho das partículas e, como no modelo aqui considerado, as partículas são sorteadas de uma mesma distribuição, essencialmente o valor numérico de saturação da porosidade é o mesmo. Para o caso considerado nesta seção, o valor encontrado foi de $P = 0.44 \pm 0.04$ independentemente do tamanho do substrato.

Como para os depósitos formados por partículas de diferentes tamanhos a porosidade apresenta o mesmo comportamento em relação a sua evolução temporal, e o seu valor de saturação é independente de L , não foram realizadas simulações adicionais para esse tipo de deposição.

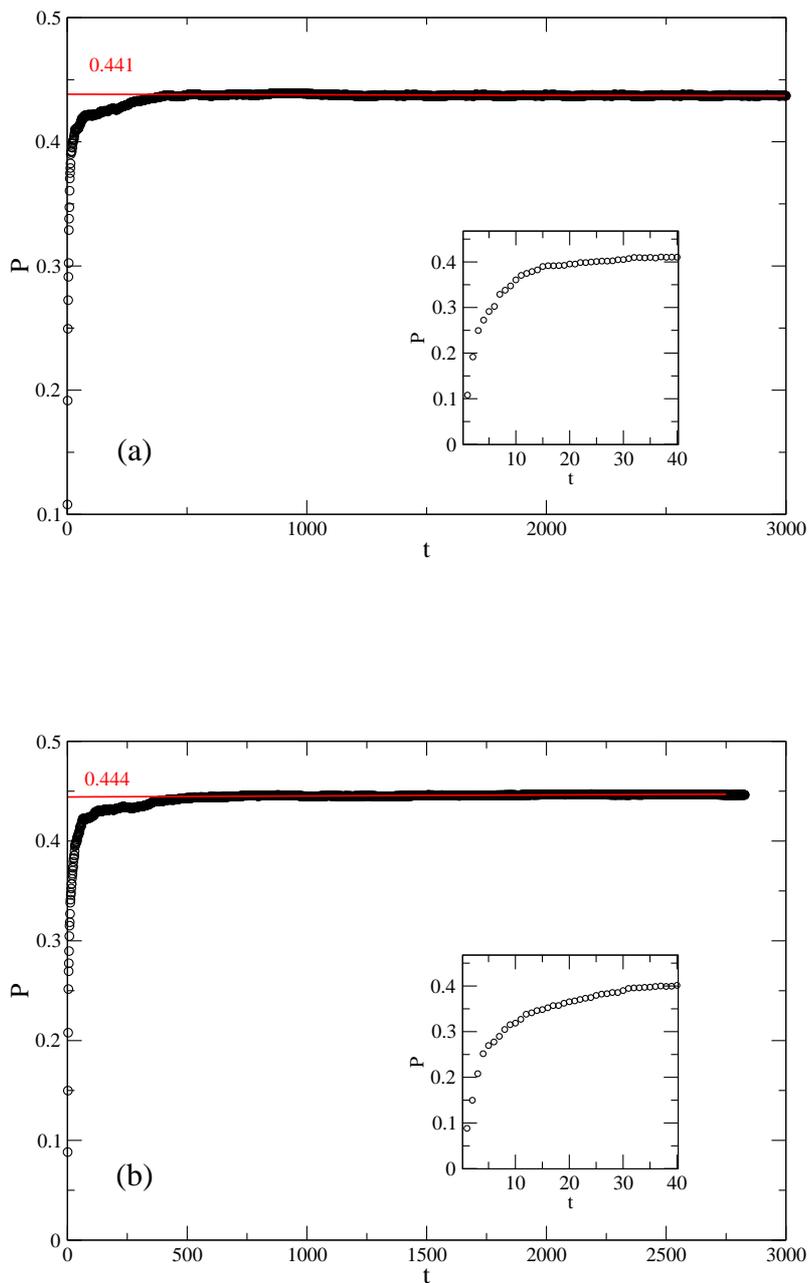


Figura 3.15: *Evolução temporal da porosidade determinada para depósitos de partículas de diferentes tamanhos em redes de tamanho (a) 128 e (b) 256.*

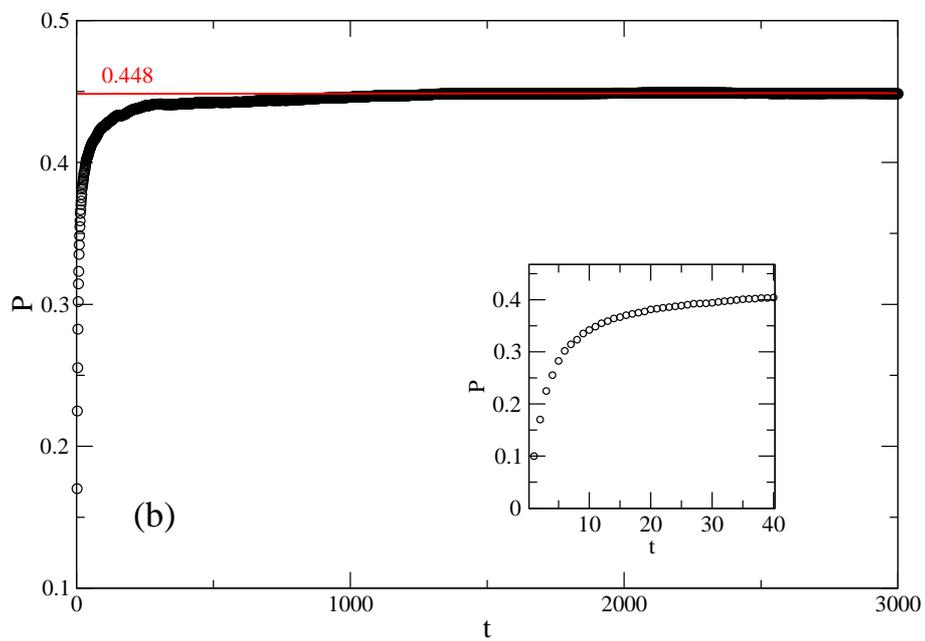
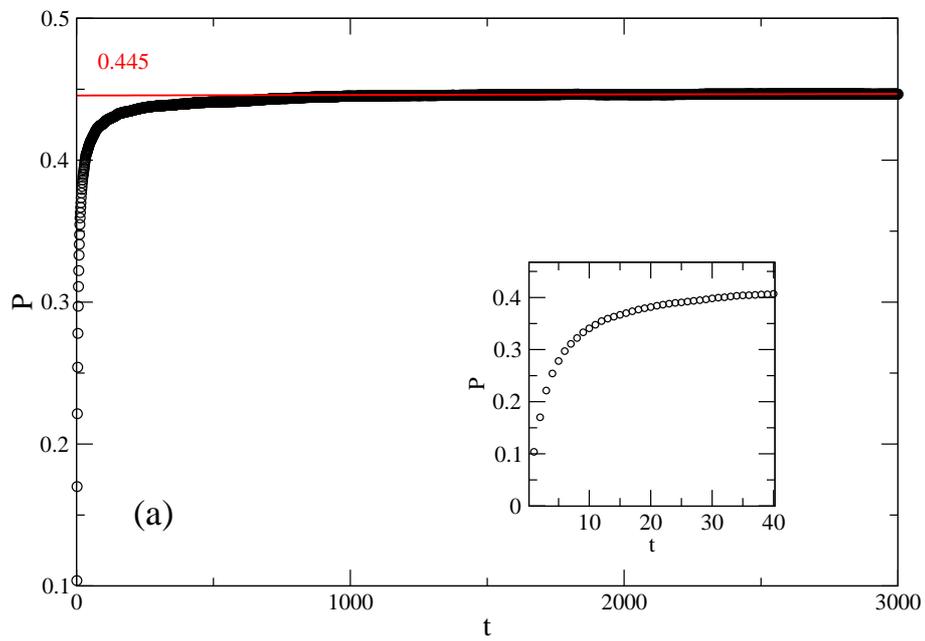


Figura 3.16: Evolução temporal da porosidade determinada para depósitos de partículas de diferentes tamanhos em redes de tamanho (a) 512 e (b) 1024.

3.4.2 Deposição de partículas idênticas

Em relação à formação de poros para agregados de partículas de apenas um único tipo, devemos recordar que partículas de tamanho unitário não formam agregados porosos, visto que a deposição aqui considerada é do tipo aleatória e, nesse caso, todas as partículas sempre são adicionadas à estrutura, sem reflexão, formando então um agregado compacto e sem poros.

As figuras 3.17, 3.18 e 3.19 exibem o comportamento da porosidade em função do tempo para diversos depósitos. Os gráficos correspondem a agregados para uma rede de tamanho 1024, e formados por partículas de tamanhos 2 a 9 unidades do parâmetro de rede. Para todos os casos, vemos que a porosidade cresce muito rapidamente nos instantes iniciais, atingindo um valor próximo ao seu valor de saturação em poucos passos de Monte Carlo. A porosidade satura em um tempo bem menor que o correspondente a rugosidade de superfície.

Um resultado esperado, e confirmado pelas nossas simulações, é a dependência da porosidade em função do tamanho das partículas agregadas ao substrato. Quando uma partícula grande é agregada, sempre são criadas áreas de sombra abaixo da partícula agregada, como foi visto na figura 3.4. Dessa forma, em um agregado formado por partículas pequenas, espera-se que a porosidade seja menor que em agregados formados por partículas grandes, e esse resultado pode ser observado nos gráficos das figuras 3.17, 3.18 e 3.19.

Na figura 3.20 mostramos o valor de saturação da porosidade em função do tamanho de partícula depositada. Podemos estimar um expoente que caracteriza o aumento da saturação da porosidade. Temos que $\rho = 0.044 \pm 0.002$, que representa o crescimento da porosidade em função da deposição de partículas de pequenos tamanhos. Já para agregados formados por partículas maiores, podemos perceber que, aproximadamente a partir de $N = 5$, vemos que o valor da porosidade se mantém praticamente constante. Mesmo para partículas maiores, podemos afirmar que o valor da porosidade não aumentaria muito mais do que aquele visto na figura 3.20, sendo que o valor esperado máximo deve ser $P = 0.5$.

Um raciocínio simples nos leva a essa conclusão para o valor máximo apresentado acima: vamos aumentar o tamanho das partículas a serem depositadas até o tamanho $N = L/2$, ou seja, metade do tamanho da rede. Pela forma como é definida a porosidade,

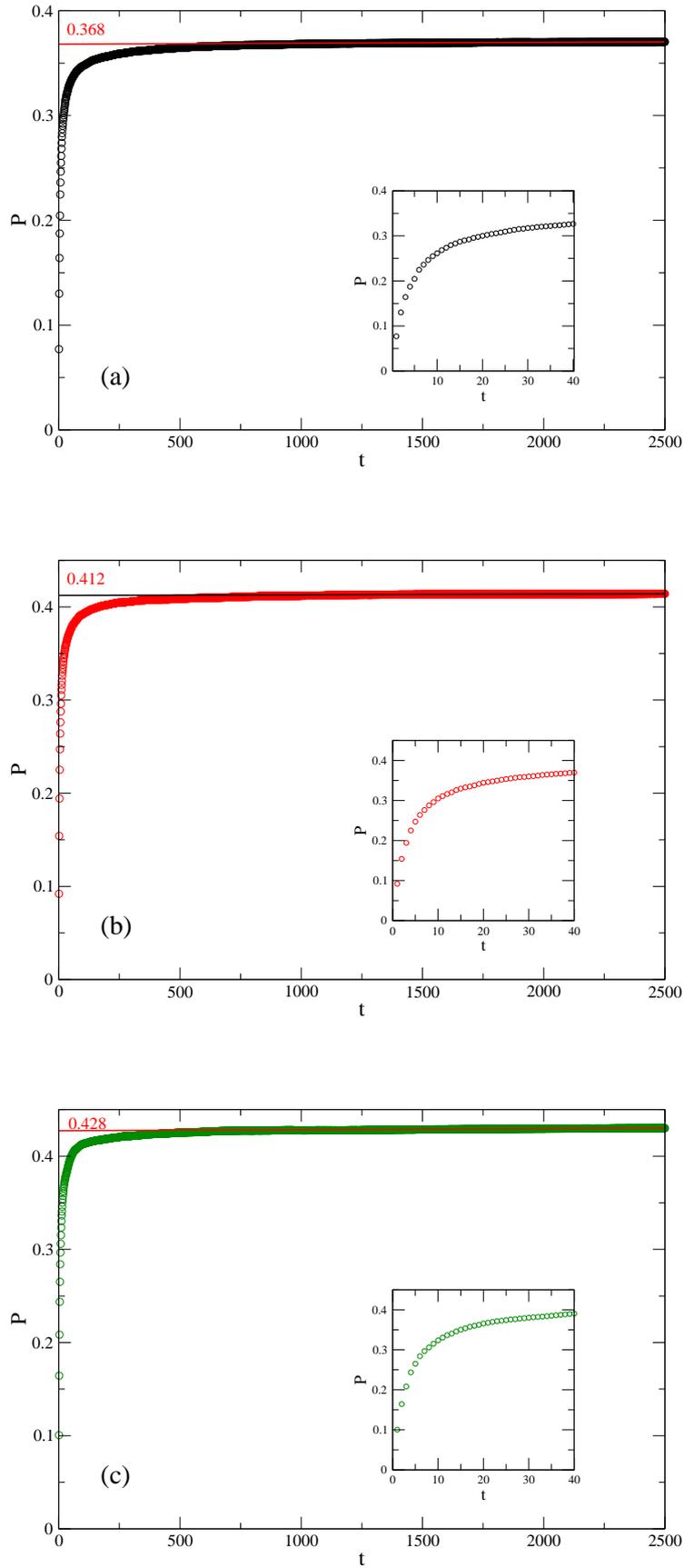


Figura 3.17: Evolução temporal da porosidade para depósitos em um substrato de tamanho $L = 1024$ e diferentes partículas, com (a) $N = 2$, (b) $N = 3$ e (c) $N = 4$.

temos que neste caso hipotético seu valor seria 0.5, pois uma nova partícula somente seria agregada ao substrato na mesma altura, caso a posição sorteada na rede para a deposição estivesse deslocada exatamente de $L/2$ da primeira partícula. Para que isto ocorra, a probabilidade é $1/L$, tornando-se muito improvável esse evento. Dessa forma, haverá somente uma partícula agregada em cada passo de Monte Carlo. Caso partículas maiores que $N = 9$ fossem depositadas, a porosidade ia sempre menor que 0.5, sendo este o limite superior para o valor de saturação da porosidade. Se $N > L/2$, a porosidade seria dada por

$$P = \frac{L - N}{L}, \quad (3.3)$$

visto que somente uma partícula seria depositada em cada passo de Monte Carlo.

Nossos resultados mostram que mesmo com a deposição de partículas relativamente pequenas em relação ao tamanho da rede, atingimos valores próximos ao limite esperado para essa grandeza.

Quando voltamos nossa atenção para os tempos iniciais, verificamos que a porosidade atinge seu valor de saturação em muito pouco tempo, como pode ser observado no gráfico da figura 3.21. Neste caso, foram depositadas 50% de partículas de tamanho 1 e 50% de partículas de tamanho 2, para três diferentes tamanhos de rede: 128, 256 e 512. Percebemos que pelo fato de depositarmos partículas de tamanho maior que uma unidade de rede já leva à formação de um depósito extremamente poroso para o modelo aqui considerado. Mesmo a inserção de um pequeno número de partículas de tamanho 2 é suficiente para promover esse tipo de comportamento no volume gerado pela deposição [27].

Na figura 3.21, notamos que independentemente do tamanho da rede considerada, o comportamento apresentado é essencialmente o mesmo. A partir de aproximadamente 50 MCS já observamos um regime estacionário para a porosidade. Isso nos leva a pensar que a partir desse instante de tempo o número médio de partículas agregadas por camada do substrato mantém-se constante ao longo do tempo. Note que esse tempo é bem menor que aquele relativo à saturação da largura de interface, onde o sistema está totalmente correlacionado.

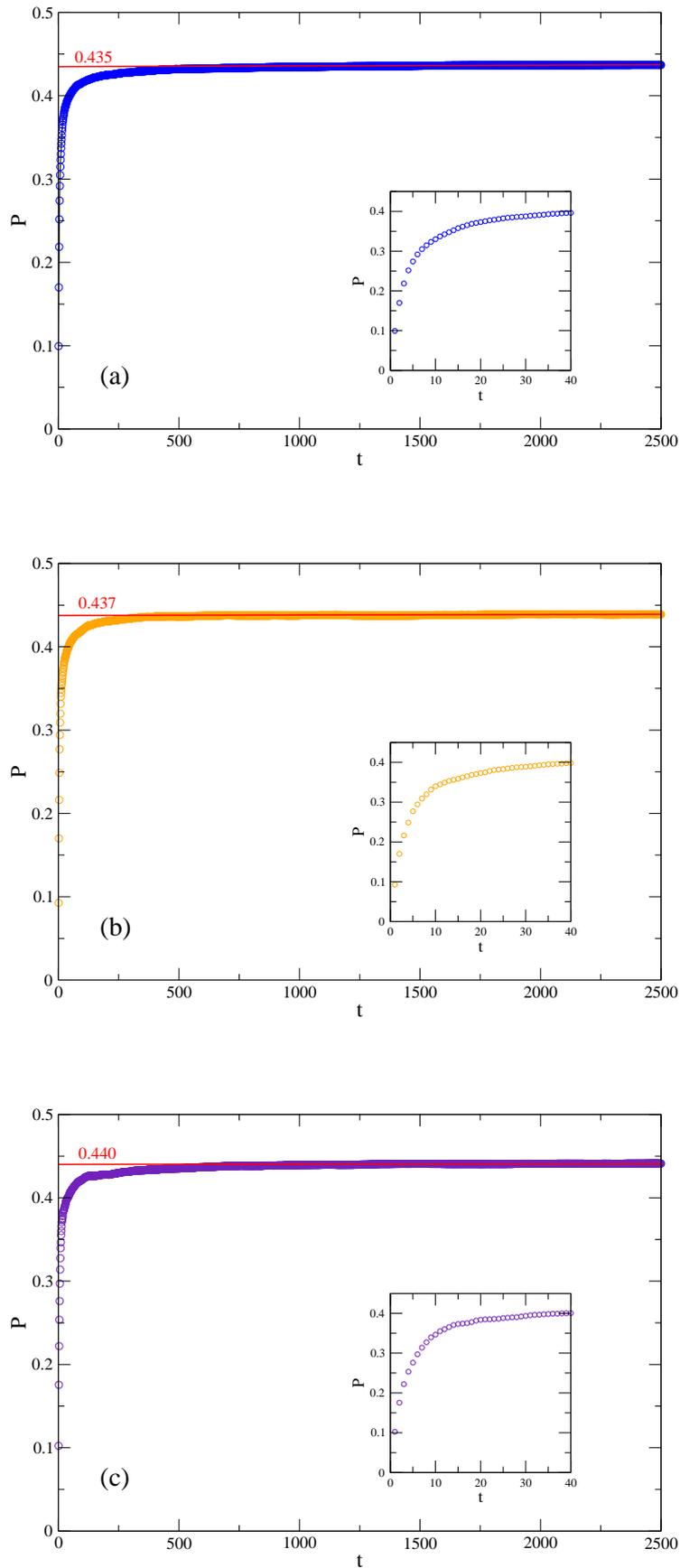


Figura 3.18: Evolução temporal da porosidade para depósitos em um substrato de tamanho $L = 1024$ e diferentes partículas, com (a) $N = 5$, (b) $N = 6$ e (c) $N = 7$.

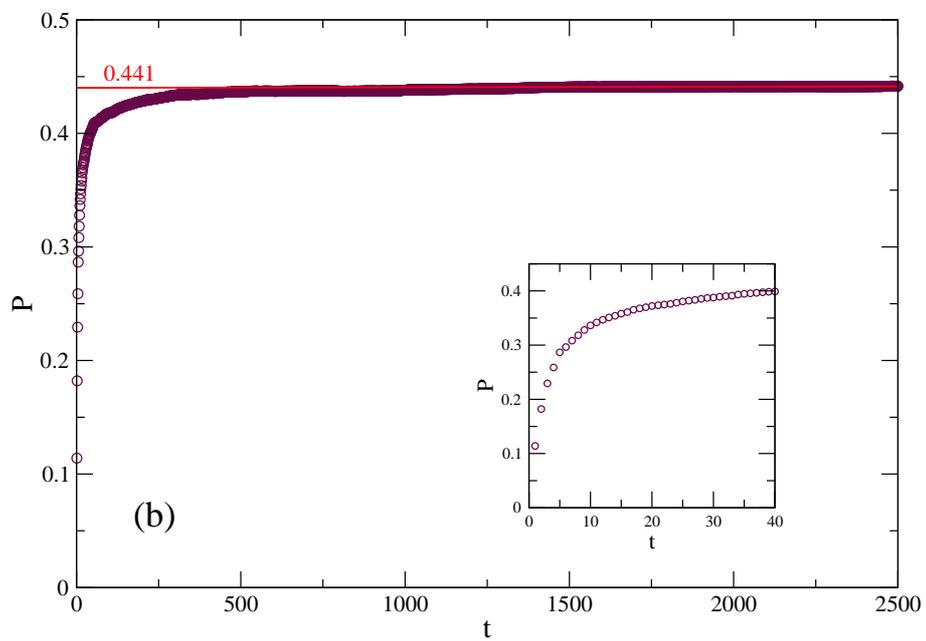
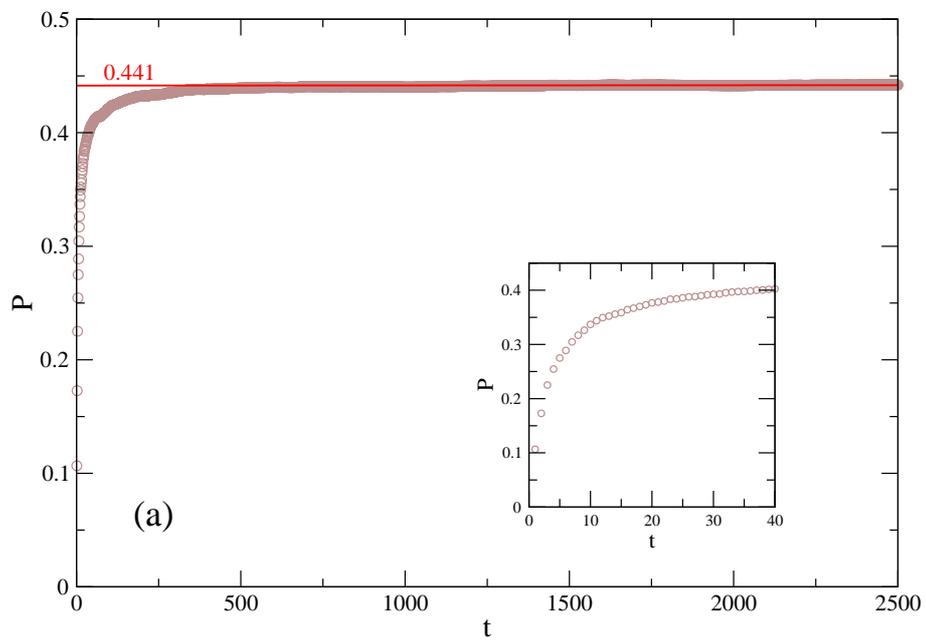


Figura 3.19: *Evolução temporal da porosidade para depósitos em um substrato de tamanho $L = 1024$ e diferentes tamanhos de partículas. (a) $N = 8$ e (b) $N = 9$.*

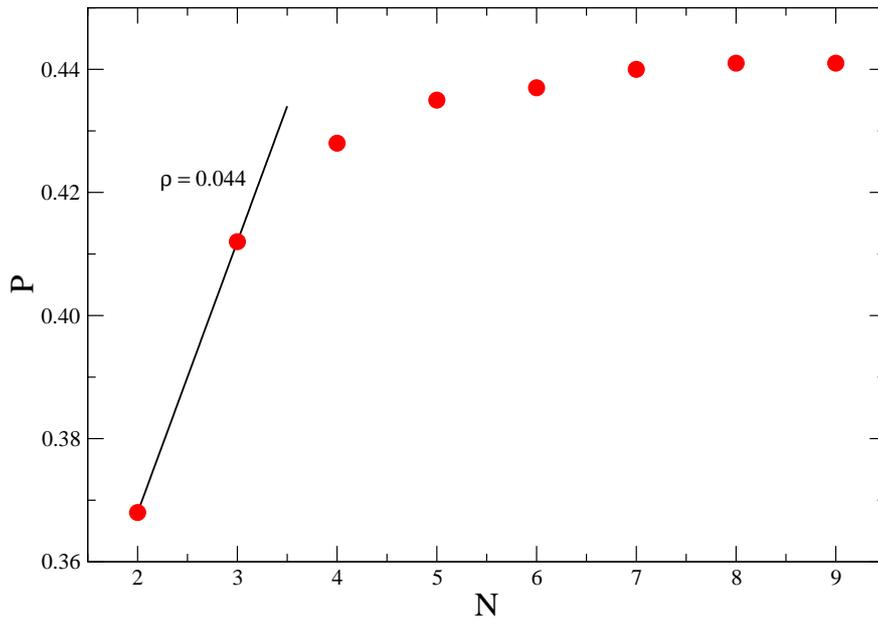


Figura 3.20: Porosidade dos depósitos formados em função do tamanho da partícula, para uma rede com $L = 1024$.

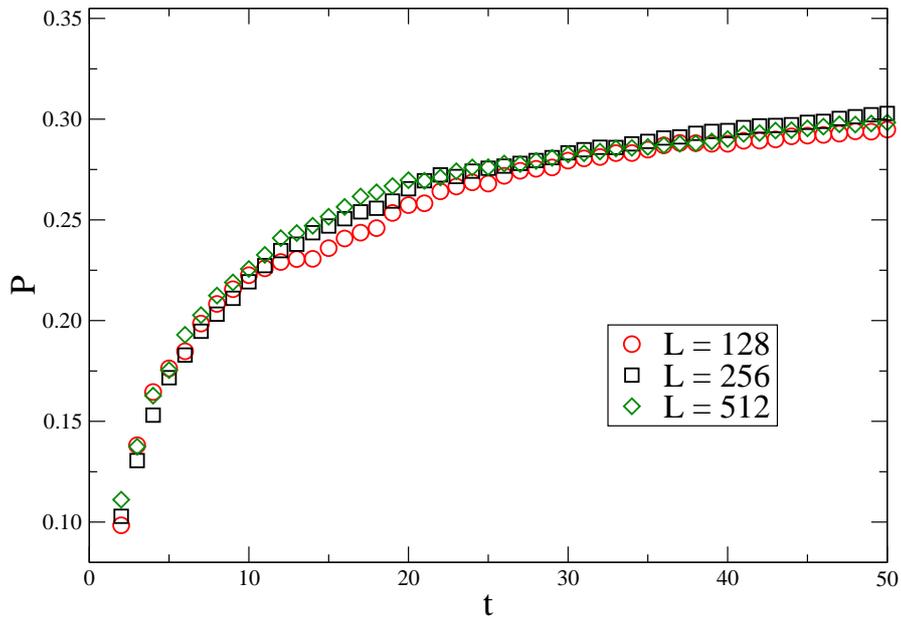


Figura 3.21: Porosidade dos depósitos formados por partículas de tamanhos 1 e 2, em redes lineares com $L = 128$, 256 e 512.

4 DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS EM (2 + 1) DIMENSÕES

4.1 Introdução

Para realizarmos um estudo mais realista acerca dos processos de deposição e crescimento de superfícies, consideramos a formação de um agregado em um substrato plano de duas dimensões, criando assim um volume em (2 + 1) dimensões. Da mesma forma que nos estudos feitos em (1 + 1) dimensões, depositamos partículas idênticas e também mistura de partículas sobre um substrato inicialmente plano. Para o caso de partículas idênticas, seus tamanhos são maiores que uma unidade de rede e para o caso de uma mistura de partículas, utilizamos a distribuição de *Poisson* modificada para selecionar o tamanho das mesmas.

Neste capítulo serão apresentados apenas resultados preliminares. Resultados mais precisos, e para diferentes tamanhos de rede, ainda estão sendo estudados. Dadas as dificuldades computacionais de simulação em redes grandes, concentramos nosso estudo nas características qualitativas da rugosidade de superfície para redes pequenas. Também não apresentamos aqui os resultados obtidos para a porosidade, ficando esse estudo como uma sugestão para futuros trabalhos.

Resultados preliminares indicam um comportamento para a rugosidade de superfície diferente dos obtidos anteriormente, em uma dimensão. De forma geral, temos ainda dois regimes distintos para o crescimento da rugosidade de superfície, representados por β_1 e β_2 . Diferentemente da situação em (1 + 1) dimensões, observamos agora que o valor de β_2 varia com o tamanho das partículas que são agregadas ao substrato e, em geral, temos que $\beta_2 > \beta_1$. Resultados semelhantes para os expoentes de crescimento foram obtidos em estudos de crescimento de superfícies formadas pela deposição de polímeros [41].

4.2 Expoentes de Escala

Definimos, no capítulo 2, a rugosidade de superfície pela equação 2.2. Como já discutido anteriormente, o expoente de crescimento β está associado às mudanças no regime de crescimento da largura de interface. Nossos resultados sugerem que em $(2+1)$ dimensões também temos dois regimes distintos de crescimento, seguidos por uma saturação na rugosidade. Entretanto, ao contrário dos resultados obtidos para a cadeia linear, observamos nos tempos iniciais, um valor de rugosidade menor do que aquele medido nos tempos imediatamente anteriores ao regime estacionário da rugosidade de superfície ($\beta_1 < \beta_2$).

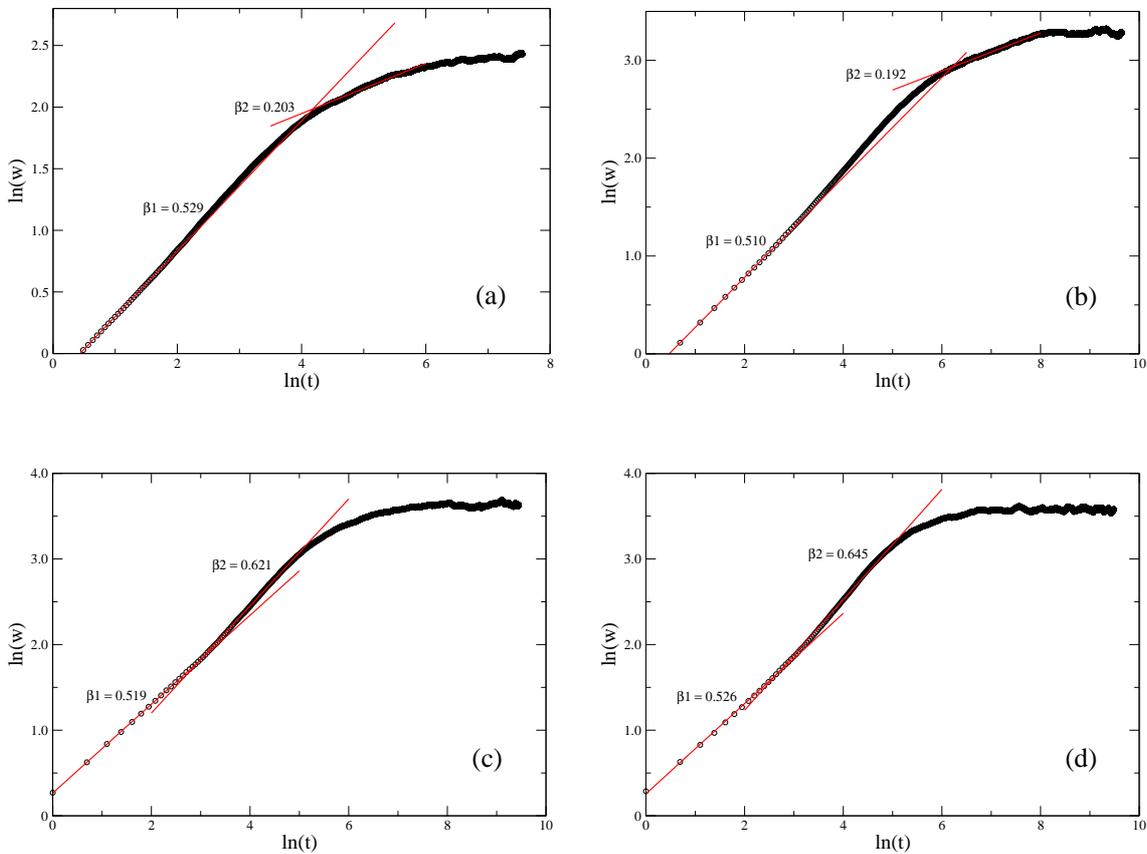


Figura 4.1: *Rugosidade de superfície para a deposição de partículas em $(2+1)$ dimensões numa rede quadrada de tamanho $L = 32$. No gráfico (a) temos um depósito de partículas de tamanhos 1 e 2, (b) tamanho 2, (c) tamanho 3 e (d) tamanho 4.*

Podemos observar nos gráficos da figura 4.1, que para os depósitos formados por partículas de tamanhos 1 e 2 o crescimento da rugosidade apresenta um comportamento bastante diferente daquele observado para depósitos formados por partículas de tamanhos

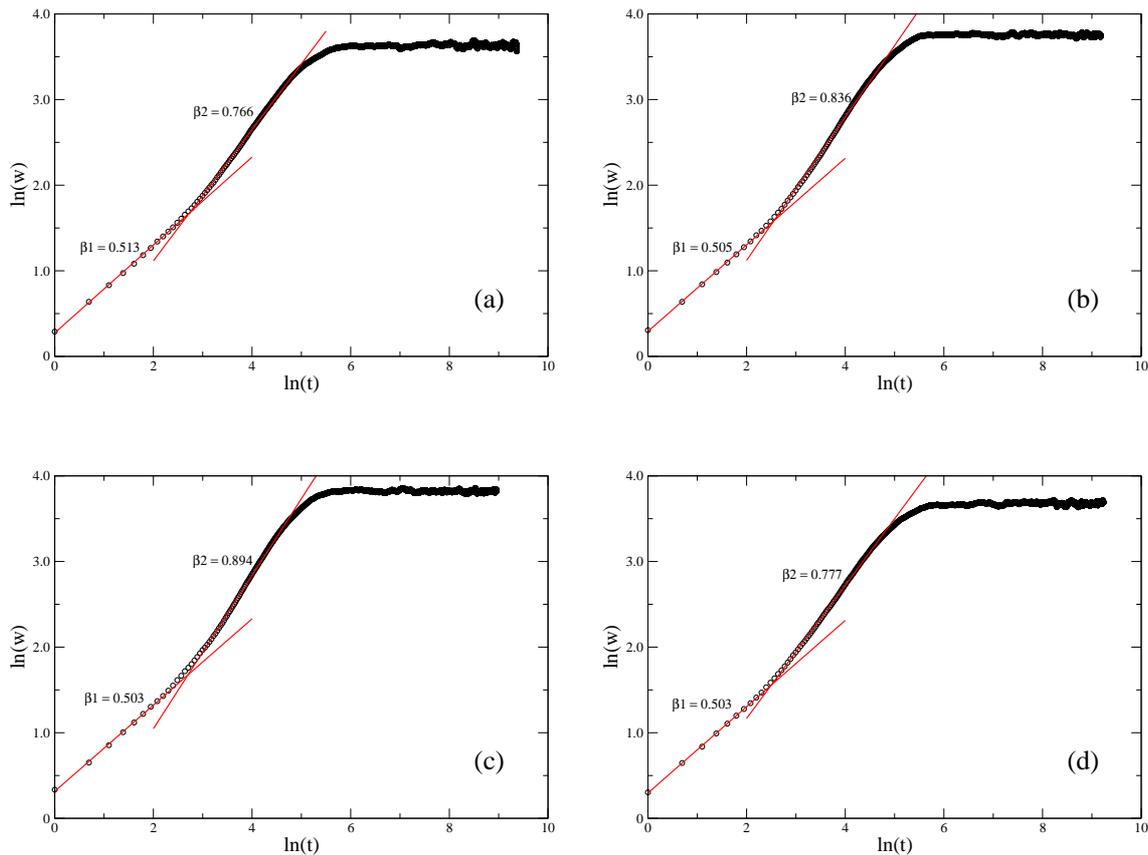


Figura 4.2: Rugosidade de superfície para a deposição de partículas em $(2+1)$ dimensões numa rede quadrada de tamanho $L = 32$. No gráfico (a) temos um depósito de partículas de tamanho 6, (b) tamanho 8, (c) tamanho 9 e (d) mistura de partículas.

maiores ou mistura de partículas, como vemos na figura 4.2. Os valores aproximados dos expoentes de crescimento β_1 e β_2 são também apresentados junto aos gráficos da figura.

Os valores dos expoentes de crescimento, para os instantes iniciais do depósito, sugerem que temos um comportamento tipicamente aleatório, com valores muito próximos de $\frac{1}{2}$. Já para tempos longos, nossos resultados sugerem que o expoente de crescimento β_2 depende do tamanho da partícula que é depositada. Para tempos suficientemente grandes, a rugosidade atinge um regime estacionário, apresentando uma dependência em função dos tamanhos de rede e partícula.

Realizamos também algumas simulações para redes maiores, que são apresentados nos gráficos das figuras 4.3 e 4.4, onde depositamos as partículas numa rede quadrada de dimensão linear $L = 64$. Atualmente estamos realizando simulações para redes maiores, com $L = 128$, $L = 256$ e $L = 512$, porém essas simulações demandam mais tempo de computação, e por esse motivo não serão apresentados nesta dissertação. Os resultados

estimados para os valores de saturação da rugosidade e para os expoentes de crescimento estão resumidos na tabela 4.1 para $L = 32$ e na tabela 4.2 para $L = 64$.

Pensamos que os resultados obtidos em $(2+1)$ dimensões diferem daqueles em $(1+1)$ dimensões, principalmente pela possibilidade de assumirmos que partículas podem ser rejeitadas. Para os sistemas discutidos no capítulo 3, a taxa de rejeição de partículas é muito maior, devido a sua menor dimensão. Já para a deposição num substrato bidimensional, a probabilidade de uma partícula grande ser adicionada ao substrato é bem maior, pois agora temos duas direções independentes para a deposição de partículas de um dado tamanho.

Tamanho da Partícula (N)	β_1	β_2	$\ln(w_{sat})$
1 e 2	0.53 ± 0.01	0.20 ± 0.01	2.4 ± 0.2
2	0.51 ± 0.01	0.19 ± 0.01	3.3 ± 0.1
3	0.52 ± 0.01	0.62 ± 0.01	3.6 ± 0.1
4	0.52 ± 0.01	0.64 ± 0.01	3.6 ± 0.2
6	0.51 ± 0.01	0.77 ± 0.01	3.6 ± 0.2
8	0.50 ± 0.01	0.84 ± 0.01	3.77 ± 0.03
9	0.50 ± 0.01	0.89 ± 0.01	3.83 ± 0.01
Mistura	0.50 ± 0.01	0.77 ± 0.01	3.67 ± 0.01

Tabela 4.1: *Expoentes de crescimento β_1 , β_2 e valor de saturação da rugosidade para uma rede quadrada com $L = 32$, e depósitos formados por partículas de tamanhos variados.*

Tamanho da Partícula (N)	β_1	β_2	$\ln(w_{sat})$
1 e 2	0.51 ± 0.01	0.21 ± 0.01	4.0 ± 0.9
2	0.50 ± 0.01	0.20 ± 0.01	3.6 ± 0.9
3	0.50 ± 0.01	0.63 ± 0.01	3.7 ± 0.4
4	0.49 ± 0.01	0.63 ± 0.01	3.8 ± 0.9
6	0.50 ± 0.01	0.63 ± 0.01	3.7 ± 0.6
8	0.52 ± 0.01	0.89 ± 0.01	3.9 ± 0.9
9	0.51 ± 0.01	0.85 ± 0.01	3.9 ± 0.9
Mistura	0.51 ± 0.01	0.79 ± 0.01	3.9 ± 0.2

Tabela 4.2: Expoentes de crescimento β_1 , β_2 e valor de saturação da rugosidade para uma rede quadrada com $L = 64$ e depósitos formados por partículas de tamanhos variados.

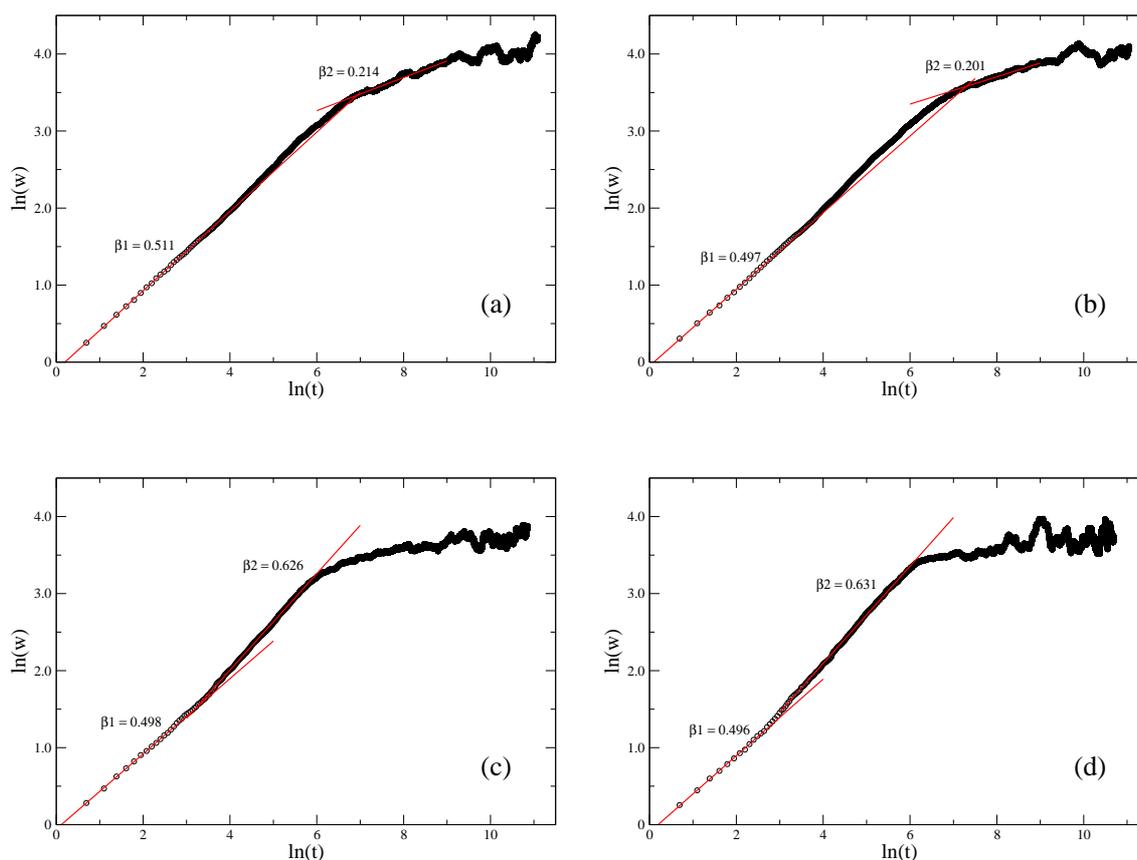


Figura 4.3: Rugosidade de superfície para a deposição de partículas em $(2+1)$ dimensões para uma rede de tamanho $L = 64$. No gráfico (a) temos um depósito de partículas de tamanhos 1 e 2, (b) tamanho 2, (c) tamanho 3 e (d) tamanho 4.

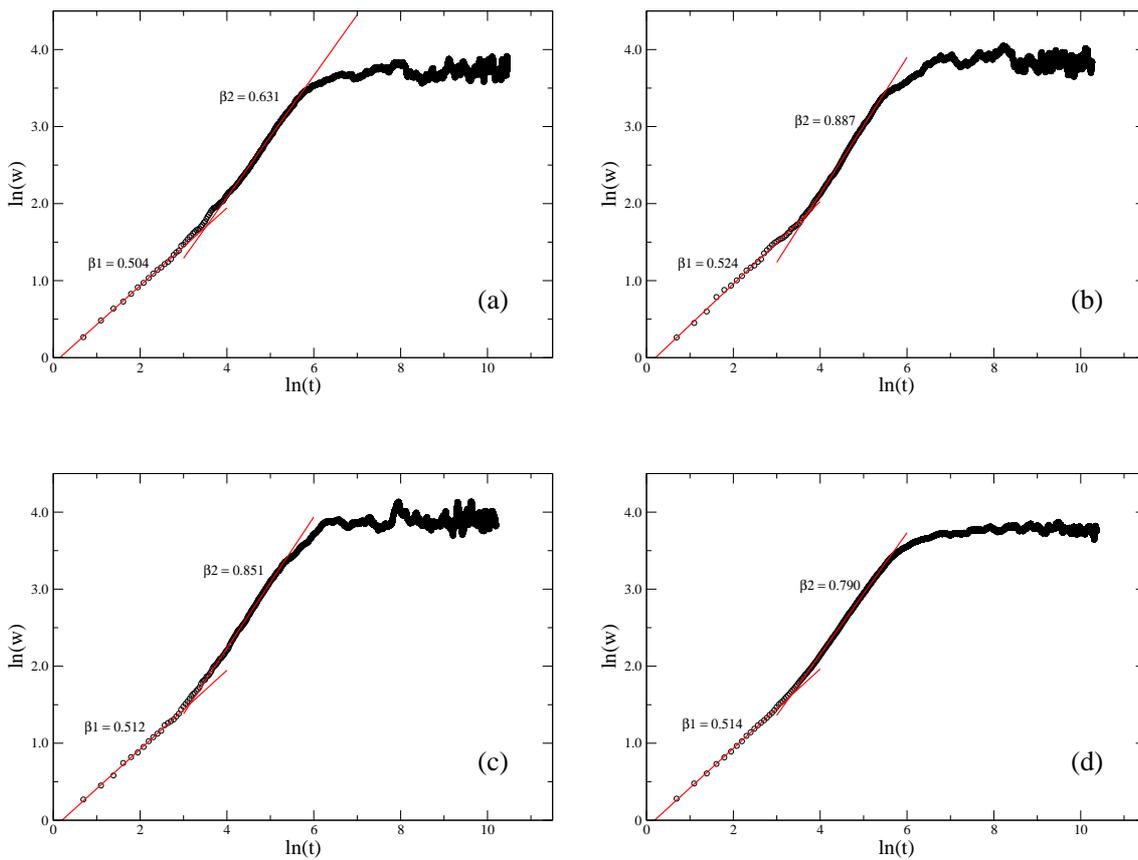


Figura 4.4: Rugosidade de superfície para a deposição de partículas em $(2+1)$ dimensões para uma rede de tamanho $L = 64$. No gráfico (a) temos um depósito de partículas de tamanho 6, (b) tamanho 8, (c) tamanho 9 e (d) mistura de partículas.

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho estudamos a dinâmica de superfície para a deposição de partículas de diferentes tamanhos, em uma e duas dimensões. Propusemos um modelo onde partículas de diferentes tamanhos são depositadas em um substrato inicialmente plano, seguindo as regras de deposição do modelo aleatório. Consideramos ainda a possibilidade de algumas partículas serem refletidas na interface, sem serem agregadas ao substrato.

Utilizando simulações de Monte Carlo, determinamos os expoentes de escala relacionados ao crescimento da rugosidade, β_1 e β_2 , a saturação da largura de interface α e o expoente dinâmico z . Também realizamos um estudo da porosidade formada pela deposição de partículas de tamanhos grandes. Observamos que, diferentemente do modelo usual de deposição aleatória, o modelo proposto apresenta saturação na rugosidade de superfície, um efeito que é devido ao aparecimento de correlações espaciais no sistema. Em nosso modelo, a correlação é introduzida pela deposição de partículas maiores que um parâmetro de rede.

A partir de nossas simulações em $(1 + 1)$ dimensões, verificamos que a rugosidade de superfície cresce exibindo dois regimes distintos, e atinge, após um tempo suficientemente grande, um regime de saturação. Para depósitos formados por misturas de partículas, obtivemos β_1 variando de 0.464 a 0.538. Já para depósitos formados por partículas idênticas, β_1 varia de 0.519 a 0.574. Esses resultados são próximos do valor $\frac{1}{2}$, que é o valor exato para o modelo de deposição aleatória. Observamos uma mudança no regime de crescimento, com a rugosidade passando a crescer mais lentamente, com β_2 variando de 0.224 a 0.325, tanto para partículas idênticas quanto para uma mistura de partículas. Já para o expoente de saturação, temos que α varia de 0.455 a 0.461.

No estudo da porosidade, consideramos a evolução temporal da porosidade global do agregado. Verificamos que para tempos muito curtos a porosidade cresce rapidamente, atingindo em seguida um regime estacionário. Vimos, que para os depósitos formados por partículas de tamanhos maiores, a porosidade cresce, mas também apresenta um valor de

saturação. Em geral, os agregados apresentam porosidade em torno de 0.4, onde indicamos que para o nosso modelo, o valor máximo permitido da porosidade seria de 0.5.

Para as simulações em $(2 + 1)$ dimensões, apresentamos apenas alguns resultados preliminares. Nossas análises apontam para um comportamento diferente da rugosidade de superfície. Para os instantes iniciais, verificamos que a rugosidade cresce como em uma deposição aleatória usual, com valores de β_1 muito próximos a $\frac{1}{2}$. Já para tempos intermediários, observamos um crescimento mais rápido da rugosidade, seguido por sua saturação. O expoente β_2 depende do tamanho das partículas que formam o agregado, sendo ainda necessário mais simulações para determinarmos valores mais precisos para esses expoentes, principalmente no que se refere a sua dependência com tamanho das redes.

Como perspectivas futuras para este trabalho, devemos concentrar nossos esforços na análise mais detalhada dos agregados formados pela deposição de partículas de tamanhos grandes para o crescimento em $(2 + 1)$ dimensões, encontrando seus expoentes de crescimento, rugosidade e dinâmico. Também deve ser dada alguma atenção especial à porosidade do volume formado por esses agregados, estudando-se o seu comportamento em função dos tamanhos de rede e de partículas. Além desses estudos, podemos ainda implementar no modelo aqui proposto outras propriedades importantes, como por exemplo, a possibilidade de relaxação de superfície.

REFERÊNCIAS

- [1] Barabási, A., Stanley, H. E., *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University Press, Great Britain, 1995.
- [2] Meakin, P., *Fractals, Scaling and Growth far from Equilibrium*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [3] Albano, E. V., Salvarezza, R. C., Vásquez, L., Arvia, A. J., *Physical Review B* **59**, 7354 (1999).
- [4] Bahraminasab, A., Movahed, M. S., Nassiri, S. D., Masoudi, A. A., *Journal of Statistical Physics* **124**, 1471 (2006).
- [5] Bouchbinder, E., Procaccia, I., *Physical Review Letters* **96**, 055509 (2006).
- [6] Das Sarma, S., Tamborenea, P., *Physical Review Letters* **66**, 325 (1991).
- [7] Drossel, B., Kardar, M., *Physical Review Letters* **85**, 614 (2000).
- [8] Newman, M. E. J. Barkema, G. T., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press, Oxford, 1999.
- [9] Ojeda, F., Cuerno, R., Salvarezza, R. C., Vásquez L., *Physical Review Letters* **84**, 3125, (2000).
- [10] Vásquez, L., Salvarezza, R. C., Herrasti, P., Vara, J. M., Arvia, A. J., *Physical Review B* **52**, 2032 (1995).
- [11] Barato, A. C., Oliveira, M. J., *Journal of Physics A* **40**, 8205 (2007).
- [12] El-Nassar, H. F., Cerdeira, H. A., *Physical Review E* **61**, 6149 (2000).
- [13] Wang, W., Cerdeira, H. A., *Physical Review E* **47**, 3357 (1993).
- [14] Wang, W., Cerdeira, H. A., *Physical Review E* **52**, 6308 (1995).

- [15] Family, F., Vicsek, T., Journal of Physics A **18**, L75 (1985).
- [16] Horowitz, C. M., Albano, E. V., Journal of Physics A **34** (2001).
- [17] Horowitz, C. M., Pasquale, M. A., Albano, E. V., Arvia, A. J., Physical Review B **70**, 033406 (2004).
- [18] Reis, F. D. A. A., Physical Review E **73**, 021605 (2006).
- [19] Braunstein, L. A., Lam, C. H., Physical Review E **72**, 026128 (2005).
- [20] Edwards, S. F., Wilkinson, D. R. Proc. R. Soc. London A **381**, 17 (1982).
- [21] Nattermann, T., Tang, L., Physical Review A **45**, 7156 (1992).
- [22] Reis, F. D. A. A., Physical Review E **63**, 056116 (2001).
- [23] Euzébio, J. A. R. *Simulação de modelos na classe KPZ em 3 e 4 dimensões*. 2005, 58 f. Dissertação (Mestrado em Física), Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, 2005.
- [24] Grynberg, M. D., Physical Review E **76**, 31705 (2007).
- [25] Kardar, M., Parisi, G., Zhang, Y., Physical Review Letters **56**, 889 (1986).
- [26] Reis, F. D. A. A., Physica A **364**, 190 (2006).
- [27] Silveira, F. A., Reis, F. D. A. A., Physical Review E **75**, 061608 (2007).
- [28] Tassopoulos, M., O'Brien, J.A., Rosner, D.E., AIChE Journal **35**, 967 (1989).
- [29] Tarafdar, S., Roy, S., Physica B **254**, 28-36 (1998).
- [30] Karmakar, R., Dutta, T., Lebovka, N., Tarafdar, S., Physica A **348**, 236 (2005).
- [31] Cavalcanti, W. L., Santos, M., Figueiredo, W., Physica A **322**, 467 (2003).
- [32] Cavalcanti, W. L., *Simulações de Monte Carlo para o crescimento de superfícies eletrodepositadas*. 2003, 95 f. Tese (Doutorado em Física), Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina.
- [33] Mendes, L. J. N., Bazzo, E., Azevedo, J. L. T., Figueiredo, W. Eighth International Conference on Energy for a Clean Environment, Clean Air 14.3, Lisboa, (2005).

- [34] Mendes, L. J. N., Forgerini, F. L., Figueiredo, W., Bazzo, E., Azevedo, J. L. T., ECOS Conference-2006, 373 (2006).
- [35] Santos, M., Figueiredo, W., Brazilian Journal of Physics, vol **34**, 429 (2004).
- [36] Santos, M., Figueiredo, W., Reis, F. D. A. A., Physica A **371**, 92 (2006).
- [37] Oliveira, T. J., Reis, F. D. A. A., Physical Review E **76**, 061601 (2007).
- [38] Fernandes, C. *Caracterização morfotopologica de espaços porosos: reconstituição multiescala e simulação de processos de invasão de fluidos não-molhantes*. 1994, 167 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica), Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina.
- [39] Mandelbrot, B. B., *The Fractal Geometry of Nature*. W. H. Freeman and Company, New York, 1983.
- [40] Colaiori, F., Moore, M. A., Physical Review Letters **86**, 3946 (2001).
- [41] Family, F., Pandey, R. B., Bentrem, F. W., Physical Review E, **62**, 914 (2000).
- [42] Medina, E., Hwa, T., Kardar, M., Zhang, Y., Physical Review A **39**, 3053 (1989).
- [43] Santos, M., Cavalcanti, W. L., Pasa, A. A., Figueiredo, W., Physica A **308**, 313 (2002).

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)