

Estudo de modelos de crescimento de interfaces em uma dimensão

Joelma de Oliveira¹, joelmaoliveira@faminas.edu.br

1. Doutoranda em Física pela Universidade Federal de Viçosa (UFV), MG; professora na Faculdade de Minas (FAMINAS), Muriaé, MG.

RESUMO: O presente trabalho tem como objetivo fazer uma revisão bibliográfica de alguns modelos discretos de deposição de partículas para o entendimento da morfologia e dinâmica de crescimento de interfaces, cujos estudos têm contribuído de forma considerável para o avanço tecnológico. Além disso, desenvolver algoritmos numéricos para descrever o comportamento de determinados sistemas. Os modelos reproduzidos foram os de deposição aleatória, deposição aleatória com relaxação, deposição aleatória com recusa de partículas e difusão de partículas com ativação térmica. Os resultados apresentados estão em conformidade com os encontrados na literatura, confirmando a validade dos algoritmos empregados na simulação.

Palavras-chave: interfaces, algoritmos numéricos.

RESUMEN: estudio de los modelos de crecimiento de interfaces en una dimensión. El presente trabajo tiene como objetivo hacer una revisión bibliográfica de algunos modelos discretos de deposición de partículas para el entendimiento de la morfología y dinámica del crecimiento de interfaces, cuyos estudios han contribuido de forma considerable para el avance tecnológico. Además, desenvolver



algoritmos numéricos para describir el comportamiento de determinados sistemas. Los modelos producidos fueron los de deposición aleatoria, deposición aleatoria con relaje, deposición aleatoria con recusa de partículas y difusión de partículas con activación térmica. Los resultados presentados están en conformidad con los encontrados en la literatura, confirmando la validez de los algoritmos empleados en la simulación.

Palabras llaves: interfaces, algoritmos numéricos.

ABSTRACT: Study of models of interfaces growth in a dimension. The present work has the objective to do a bibliographical review of some discrete models of deposition of particles for the understanding of the morphology and interfaces growth dynamics, whose studies have contributed in considerable way for the technological advance. Besides this, to develop numerical algorithms for describing the behavior of some systems. The models reproduced were the ones of random deposition, random deposition with relaxation, random deposition with refusal of particles and diffusion of particles with thermal acceleration. The results presented are in conformity with the ones found in the literature, confirming the validity of the employed algorithms in the simulation.

Keywords: interfaces, numerical algorithms.

Nos últimos anos, o estudo da morfologia e dinâmica de crescimento de interfaces (EDWARDS; WILKINSON, 1982; KARDAR; PARISI; ZHANG, 1986; FAMILY, 1986) por meio de simulações computacionais de modelos discretos de deposição de partículas, tem contribuído de forma considerável para o desenvolvimento tecnológico e avanço na mecânica estatística de não-equilíbrio (BARABÁSI; STANLEY, 1995). Os modelos discretos favorecem a ligação entre experimentos e a teoria, com a vantagem de poder separar efeitos secundários sempre presentes nos experimentos, possibilitando o estudo de mecanismos em processos de crescimento como, por exemplo, a difusão de partículas em superfícies. Nesse sentido, tentamos reproduzir, através de alguns modelos discretos, os processos mais relevantes que ocorrem durante a evolução de crescimento de superfícies, considerando os detalhes microscópicos e procurando por expoentes críticos associados às leis de potência que determinam a

classe de universalidade (EDWARDS; WILKINSON, 1982; KARDAR; PARISI; ZHANG, 1986) correspondente a cada sistema.

No presente trabalho apresentamos, inicialmente, resultados que obtivemos através de simulações computacionais para os modelos de crescimento de interface (VICSEK, 1989) por deposição aleatória (DA), deposição aleatória com relaxação da superfície (DAR – Modelo de Family) (FAMILY, 1986) e deposição aleatória com recusa de partículas (KK – modelo de Kim-Kosterlitz) (KIM; KOSTERLITZ, 1989), cujos algoritmos foram desenvolvidos na linguagem FORTRAN 90. Vale salientar que os três modelos mencionados são discutidos a título de revisão para uma melhor compreensão da dinâmica de crescimento de interfaces. Por último, expomos os resultados de um modelo de crescimento com ativação térmica (DAS SARMA; TAMBORENEA, 1991), mais realista, e próximo de aspectos presentes em crescimento de interfaces via técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE) em que a probabilidade de difusão das partículas é bem específica. Em síntese, nosso trabalho tem como objetivos fazer uma revisão de alguns aspectos dos modelos de crescimento mais comuns na literatura, através de regras simples, e discutir os resultados do modelo de crescimento com ativação térmica.

Quantitativamente, podemos descrever o crescimento de interfaces concebendo que os modelos exibem propriedades de escala dadas por:

$$W = \begin{cases} t^{\beta} & \text{para } t_0 \ll t_{sat} \ll t \\ L^{\alpha} & \text{para } t \gg t_{sat} \end{cases}$$

onde β e α são os expoentes de crescimento cinético e de rugosidade, respectivamente; W é a largura da interface (ou rugosidade total), definida como o desvio quadrático médio das alturas:

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

em que $\bar{h}(t)$ é a altura média da interface no instante t , $h_i(t)$ é a altura do sítio i no tempo t com $i = 1, 2, \dots, L^d$, em que L^d representa o tamanho da superfície de crescimento em $d + 1$ dimensões; e t_0 e t_{sat} são escalas de tempo características de cada modelo que definem o tempo inicial e o tempo de saturação, respectivamente. A lei geral de escala dinâmica para o crescimento cinético em um sistema d -dimensional, denominada relação de escala de Family-Vicsek (BARABÁSI; STANLEY, 1995), é dada por

$$W(L,t) = L^{\hat{\alpha}} f\left(\frac{t}{L^z}\right)$$

onde f é uma função de escala que pode ser expressa como segue:

$$f(x) \sim \begin{cases} x^{\beta}, & \text{para } x \ll 1 \\ 1, & \text{para } x \gg 1. \end{cases}$$

Já o expoente z é dito dinâmico e definido como sendo a razão entre os expoentes $\hat{\alpha}$ e $\hat{\alpha}$.

Os modelos DA, DAR, KK e AT são de deposição de sólido sobre sólido (SOS – *solid on solid*), pois tratam de processos que durante a evolução temporal das superfícies não permitem porosidade no agregado, tornando-o compacto. Em nosso trabalho, por simplicidade, os modelos foram desenvolvidos em substratos unidimensionais ($d = 1 + 1$ dimensões), inicialmente lisos, onde as partículas são depositadas seguindo a regra característica de cada um.

O modelo DA é o modelo de crescimento de superfícies mais simples no qual, a cada passo de tempo, L partículas são depositadas ao acaso e cada uma delas se agrega ao topo da coluna sorteada, recebendo um incremento unitário em sua altura, ou seja, $(h_i(t) \rightarrow h_i(t) + 1)$, crescendo independentemente qualquer que seja o estado da vizinhança. Desse modo, o sistema é lateralmente decorrelacionado e, conseqüentemente, a rugosidade da interface cresce indefinidamente com o expoente de crescimento $\hat{\alpha} = 1/2$. Não podemos definir, para este modelo, os expoentes de rugosidade ($\hat{\alpha}$) e dinâmico (z). Na Figura 1, mostramos a curva Log-log da rugosidade (W) variando no tempo (t) para um tamanho de substrato $L = 100$, após 1 000 passos de tempo.

Já o modelo de DAR, proposto por Family, envolve tanto a deposição quanto a difusão das partículas depositadas ao acaso. Neste modelo, as partículas depositadas procuram na vizinhança do sítio de deposição um sítio com menor altura, desde que $h_{i+1} < h_i$ (a altura do sítio à direita é menor que a altura do sítio sorteado) ou $h_{i-1} < h_i$ (a altura do sítio à esquerda é menor que a altura do sítio sorteado). No caso em que a partícula foi depositada em um sítio em que a diferença de altura, em relação às alturas de seus vizinhos, é a mesma, ou seja, $h_{i+1} = h_{i-1}$ (a altura do sítio à direita é igual a altura do sítio à esquerda), a partícula pode ir para qualquer um dos vizinhos com igual probabilidade. Após a relaxação, as partículas fixam-se permanentemente. A procura por um sítio de menor altura pode ser limitada, permitindo à partícula difundir até uma distân-

cia máxima m , respeitando as condições acima. Os expoentes de escala (BARABÁSI; STANLEY, 1995) desse modelo independem do valor de m e, geralmente, é usado $m = 1$ para a procura do mínimo.

Como a altura de um sítio depende das alturas de seus vizinhos, o processo de difusão das partículas gera correlações laterais no sistema e, por conseguinte, há saturação da rugosidade. Os perfis das interfaces são mais lisos comparados com os obtidos usando o mesmo processo, porém sem relaxação.

Na Figura 2, expomos a evolução temporal da rugosidade para o modelo de DAR com $m = 1$, que leva a expoentes $\hat{\alpha} = 1/2$, $\hat{\beta} = 1/4$ e $z = 2$ pertencentes à classe de universalidade de Edwards e Wilkinson (EW) [1].

Outro modelo elaborado para o entendimento dos processos envolvidos no crescimento de interfaces, sugerido por Kim e Kosterlitz, é o de deposição aleatória com recusa de partículas, conhecido como modelo de Kim-Kosterlitz (KK). Nesse modelo, ocorre a deposição aleatória, porém com uma restrição na altura que impede que um sítio cresça muito mais em relação aos seus vizinhos. Assim sendo, o controle da diferença de altura máxima, entre os vizinhos, é feito por determinados valores do parâmetro s .

Para a construção desse modelo usamos a seguinte regra: escolhemos um sítio i de forma aleatória e a partícula só será depositada na coluna do sítio escolhido quando a condição de restrição da diferença das alturas (Δh) entre o sítio escolhido e seus vizinhos for satisfeita, isto é, $|\Delta h| \leq s$. Caso contrário, essa partícula será recusada, determinando um modelo não-conservativo, diferentemente dos modelos DA e DAR. Quando $s \rightarrow \infty$, o modelo apresenta o comportamento do modelo DA e, no caso em que s é pequeno, observa-se que para tempos iniciais, quando as diferenças de alturas são menores que o parâmetro s estabelecido, a deposição ocorre de maneira aleatória. Após certo tempo característico, o processo de deposição é governado pela condição de restrição, surgindo correlações entre os sítios e as interfaces apresentam-se muito mais lisas que as obtidas no processo de DA.

Nas simulações computacionais adotamos $s = 1$, em que serão aceitas para deposição somente aquelas tentativas em que a diferença de alturas ($|\Delta h|$) entre a coluna de deposição e seus primeiros vizinhos for menor ou igual a 1 (um) ($|\Delta h| \leq 1$), após a partícula ser depositada. Os valores dos expoentes dinâmicos para esse modelo são $\hat{\alpha} \approx 1/3$, $\hat{\beta} \approx 1/2$ e $z \approx 3/2$, cuja classe de universalidade correspondente é a KPZ (Kardar-Parisi-Zhang).

A evolução temporal da rugosidade, segundo o modelo KK, para um valor de tamanho do sistema $L = 100$ e $s = 1$, é mostrada na Figura 3.

Um grande número de modelos tem sido proposto (DAS SARMA; TAMBORENEA, 1991; WOLF; VILLAIN, 1990; LANDAU; PAL, 1996; LAI; SARMA, 1991; TAMBORENEA; DAS SARMA, 1993; SARMA et al, 1996) não

FIGURA 1 Evolução temporal da rugosidade para um substrato de tamanho $L = 100$.

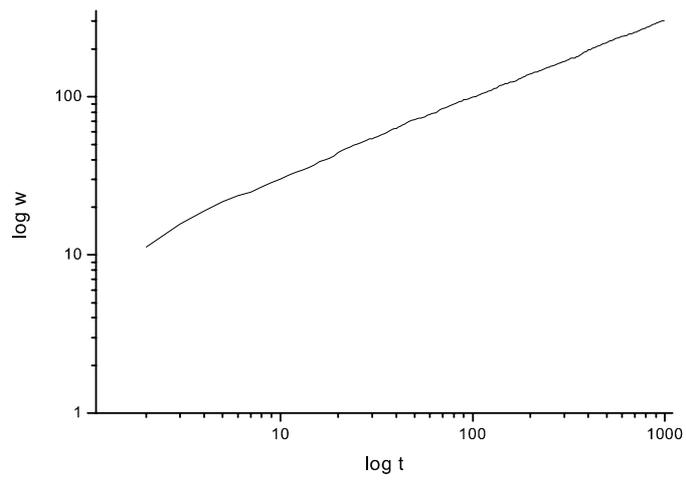
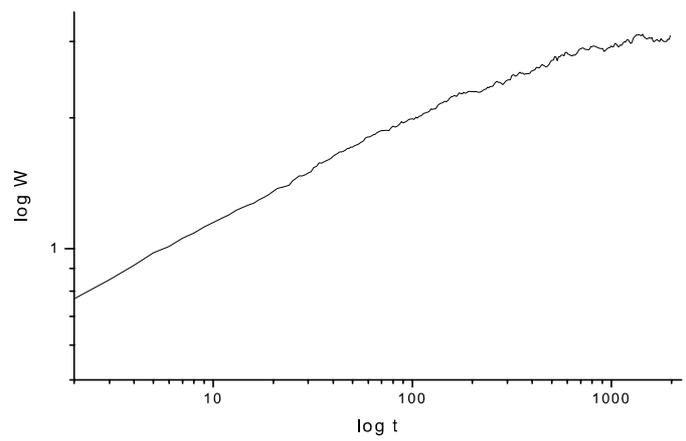


FIGURA 2 Evolução temporal da rugosidade para um tamanho de substrato $L = 200$.



somente por motivação teórica, mas também pelo interesse em compreender melhor o crescimento de interfaces via técnicas como MBE (molecular beam epitaxy), principalmente os que incorporam a ativação térmica, visando cooperar para o entendimento de processos que ocorrem com o emprego desta técnica e para aperfeiçoamento da morfologia das interfaces crescidas por ela.

Sugerimos, como apresentado anteriormente, a discussão de um modelo discreto de deposição aleatória com difusão de partículas por ativação térmica, com simulações computacionais em que a interface cresce em uma dimensão, considerando o crescimento por MBE. Nesse processo de crescimento, a difusão atômica segue a lei de Arrhenius, conforme a taxa de difusão (R):

$$R = R_0 \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right)$$

com E_A sendo a energia de ativação dependente do sítio e dada por $E_A = E_0 + nE_B$, onde E_0 é a energia de ativação de um átomo livre (sem ligações), é a energia de ligação com os vizinhos próximos e n é o número de ligações com os vizinhos próximos que o átomo depositado tem em seu local inicial antes de

difundir; $R_0 = \frac{kT}{h}$, onde K é a constante de Boltzmann, T é a temperatura

em kelvin e h é a constante de Planck. Escolhemos para os parâmetros E_0 e E_B os valores 1 eV e 0,3 eV, respectivamente. Em relação à taxa de deposição, propomos que os átomos sejam depositados na superfície a uma taxa $F = 1$, ou seja, um átomo por sítio por segundo. Além disso, empregamos o modelo de difusão para os vizinhos mais próximos e a aproximação SOS, implicando que os únicos valores que n pode assumir para ocorrer a difusão são 1 e 2. Para o caso em que n é maior que dois ($n > 2$), não ocorrerá a difusão. A probabilidade

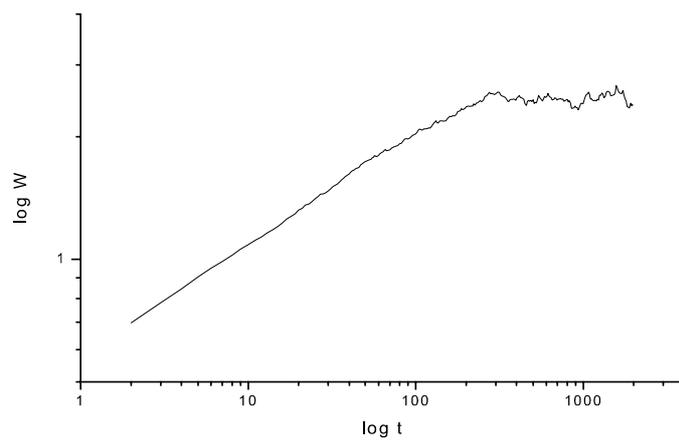
de deposição também foi definida como sendo $P_{dep} = \frac{F}{R + F}$ e a determinação

do número n de ligações adota a seguinte regra: quando a altura de um determinado sítio for igual ou menor que a altura dos sítios vizinhos (esquerda ou direita) ocorre mais uma ligação, ou seja,

$$h(k) \leq h(k-1) \Rightarrow n = n + 1$$

$$h(k) \leq h(k+1) \Rightarrow n = n + 1$$

Figura 3 Evolução temporal da rugosidade para um substrato de tamanho $L = 100$.



Observamos que o modelo de difusão com ativação térmica tem duas taxas competindo (R e F) e o tempo estipulado para deposição de partículas é dado por $t \rightarrow t + 1 / L$.

Na Figura 4, mostramos a variação dos expoentes \hat{a} medidos como uma função da temperatura.

Este modelo, para baixas temperaturas, corresponde ao modelo de DA com expoente $\hat{a} = 0,5$. Enquanto que, para temperaturas altas, uma diminuição nos valores do expoente \hat{a} ocorreu devido ao fato do comprimento de difusão ficar maior que o tamanho do sistema e permitir que os átomos procurem uma posição energeticamente favorável para fixar. Como conseqüência, a superfície fica mais lisa e a provável classe de universalidade a que o modelo pertence é a de EW, com $\hat{a} = 0,25$. Já para temperaturas intermediárias a difusão é também relevante.

Concluimos que os resultados obtidos para o expoente de crescimento \hat{a} , correspondentes aos modelos de deposição aleatória, modelo de deposição aleatória com relaxação e deposição aleatória com recusa de partículas, estão próximos dos valores presentes na literatura e, conseqüentemente, validando os algoritmos utilizados nas simulações. As diferenças evidenciadas em seus valores serão revistas para tamanhos (L) diferentes de substratos visando uma maior aproximação. Pretendemos, também, em relação ao modelo de difusão de partículas com ativação térmica, explorá-lo mais, uma vez que alguns de nossos resultados de \hat{a} como uma função da temperatura diferiram dos apresentados por Das Sarma e Tamborenea (1991). Além disso, ainda para o modelo envolvendo ativação térmica, faremos um estudo do expoente \hat{a} como uma função de R_0 / F , analisando a relação existente entre estes valores.

Referências bibliográficas

EDWARDS, S. F.; WILKINSON, D. R. **The surface statistics of a granular aggregate**. Proceedings of The Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Volume 381. 1982, p. 17.

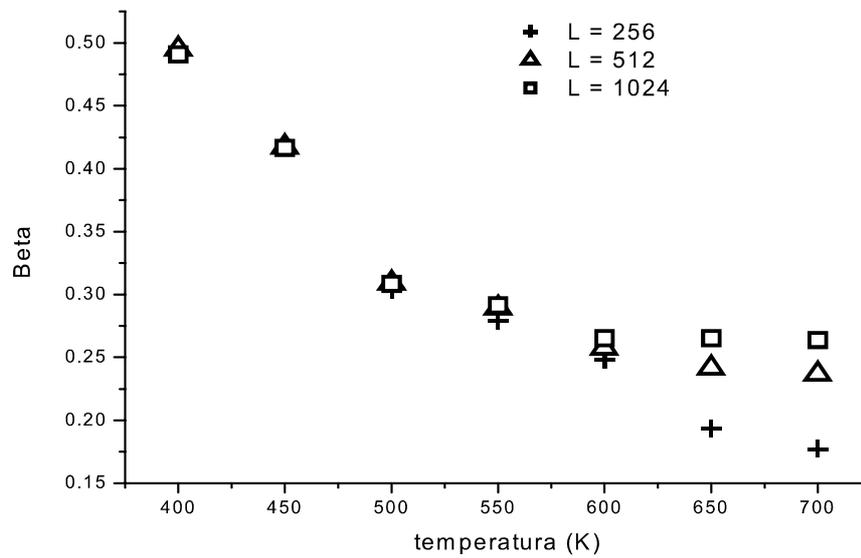
KARDAR, Mehran; PARISI, Giorgio; ZHANG, Yi-Cheng. **Dynamic scaling of growing interfaces**. Physical Review Letters, v. 56, 1986. p. 889.

FAMILY, F. **Scaling of rough surface: effects of surface diffusion**. Journal of Physics A: Mathematical and General, v. 19, 1986. p. L441.

VICSEK, Tamás. **Fractal growth phenomena**. Singapore: World Scientific, 1989.

KIM, Jin Min; KOSTERLITZ, J. M. **Growth in a restricted solid-on-solid model**. Physical Review Letters, v. 62, 1989. p. 2289.

FIGURA 4 Variação do expoente $\hat{\alpha}$ para o modelo de difusão com a temperatura. Os símbolos correspondem aos diferentes tamanhos adotados para o sistema.



DAS SARMA, S.; TAMBORENEA, P. I. **A new universality class for kinetic growth: One-dimensional molecular-beam epitaxy.** Physical Review Letters, v. 66, 1991. p. 325.

BARABÁSI, A. L.; STANLEY, H. E. **Fractal Concepts in Surface Growth.** Cambridge: Cambridge University Press, 1995.

WOLF, D. E.; VILLAIN, J. **Growth with surface-diffusion.** Europhysics Letters. v. 13, 1990. p. 389.

LANDAU, D. P.; PAL, S. **Monte Carlo simulations of simple models for thin film growth by MBE.** Thin Solid Films. v. 272, 1996. p. 184.

LAI, Z.-W.; DAS SARMA, D. **Kinetic growth with surface relaxation: continuum versus atomistic models.** Physical Review Letters v. 66, 1991. p. 2348.

TAMBORENEA, P. I.; DAS SARMA, S. **Surface-diffusion-driven kinetic growth on one-dimensional substrates.** Physical Review E, v. 48, 1993. p. 2575.

DAS SARMA, S. et al. **Scale invariance and dynamical correlations in growth models of molecular beam epitaxy.** Physical Review E. v. 53, 1996. p. 359.