

## MUDANÇA DE CLASSE DE UNIVERSALIDADE DEVIDO A INFLUÊNCIA DO ÂNGULO DE DEPOSIÇÃO EM FILMES FINOS GERADOS POR AGREGAÇÃO DE PARTÍCULAS ALEATÓRIAS

Amanda C. A. Vilas Boas<sup>1\*</sup>, Gabriela da C. Martins<sup>1</sup>, Fabricio L. Forgerini<sup>2</sup>

1. Estudante do IHAC Paulo Freire - UFSB

2. IHAC Paulo Freire - UFSB/ Orientador

### Resumo:

Estudaram-se numericamente os efeitos do ângulo de deposição de partículas no processo de crescimento de filmes finos gerados pela agregação de partículas adicionadas aleatoriamente. As partículas são agregadas aleatoriamente na superfície plana e com uma dada distribuição angular, originando com o tempo, uma interface rugosa. As simulações computacionais foram realizadas em dimensões (1+1) e, mudando o ângulo de deposição, é observada uma transição da classe de universalidade de Deposição Aleatória (DA) para a classe de universalidade de Deposição Balística. Os resultados mostram que as partículas adicionadas não perpendiculares ao substrato, podem alterar a classe de universalidade em um discreto modelo de deposição atomística aleatória. Quando as partículas são depositadas com um ângulo de 45° em relação à superfície, os mesmos valores do modelo de Deposição Balística são observados no modelo de Deposição Aleatória.

**Autorização legal:** Por se tratar de um trabalho teórico, não foi necessária autorização legal para execução do mesmo.

**Palavras-chave:** Crescimento de superfície; simulações computacionais, filmes finos.

**Apoio financeiro:** Universidade Federal do Sul da Bahia

### Introdução:

A área da física relativa aos processos termodinâmicos fora do equilíbrio é bastante complexa, não tendo até o presente momento uma teoria bem fundamentada. Por esta razão, inúmeros problemas, muitos ainda com interesse tecnológico, são estudados somente através de teorias aproximadas e de simulações numéricas assistidas por computador (MEAKIN, 1998). Alguns problemas podem ser descritos com átomos e moléculas em termos de um arranjo em rede, onde nosso foco está principalmente nos seus aspectos dinâmicos.

Grande parte destes problemas estudados pela física estatística apresenta enorme interesse tecnológico por serem passíveis de aplicações comerciais (BARABÁSI; STANLEY, 1995). Estes se utilizam de filmes finos de ligas magnéticas compostas pelos metais do grupo do ferro (Fe, Co e Ni) para a gravação magnética das informações em nossos computadores.

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. 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.

Buscamos, de forma teórica, considerar apenas alguns parâmetros e comparar nossos resultados teóricos com os dados experimentais, de forma que possamos explicar teoricamente um fenômeno natural. 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 (REIS, 2006; FORGERINI; FIGUEIREDO, 2009, 2010, 2011).

Objetiva-se, com este trabalho, construir modelos numéricos e simulações computacionais, com técnicas da área de termodinâmica fora do equilíbrio, para o estudo do crescimento de superfícies e interfaces, com deposição de partículas em diferentes ângulos em relação ao substrato.

### Metodologia:

Para se estudar a morfologia de uma superfície, calculamos a rugosidade superficial  $\omega$ , em função do tamanho linear do substrato  $L$  e do tempo  $t$ . A rugosidade  $\omega(L, t)$  é definida como a flutuação da altura quadrática média,  $\omega(L, t) = \langle [h(\vec{r}, t) - \bar{h}(t)]^2 \rangle^{1/2}$ , em que  $\bar{h}(t)$  é a altura média da superfície em um dado instante de tempo  $t$ , como representado na figura 1.

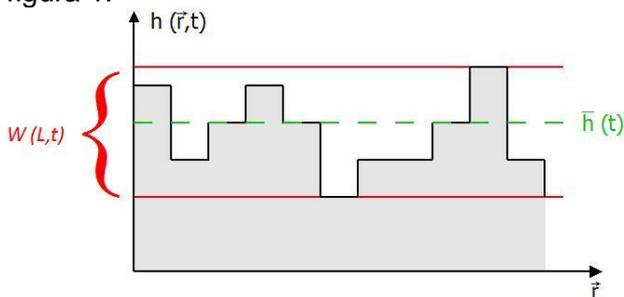


Figura 1-Representação gráfica de um corte transversal de uma superfície.

Pode-se estudar teoricamente o processo de crescimento de superfícies através de equações diferenciais estocásticas, que descrevem a interface em grandes escalas de comprimento. Esse tipo de equação tem o formato:

$$\frac{dh(\vec{r}, t)}{dt} = \varphi(\vec{r}, t) \quad \text{Eq. 1}$$

em que  $\varphi(\vec{r}, t)$  é o número de partículas depositadas na superfície numa posição  $\vec{r}$  por unidade de tempo  $t$ .

Nem todos os processos estudados possuem uma equação exata que descrevem seu comportamento. Portanto, neste estudo, nós usamos extensivamente simulações computacionais numéricas para obter expoentes característicos da evolução da superfície.

Os expoentes mais comuns,  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $z$  são obtidos em equações como a Eq. 1 ou através de simulações computacionais, em que  $\alpha$  está relacionado com a saturação da

rugosidade,  $z$  é o expoente dinâmico, e  $\beta$  é o expoente que caracteriza a evolução da rugosidade. Estes expoentes são relacionados pela equação  $z = \alpha/\beta$ .

Neste estudo, fizemos a deposição de partículas de tamanho unitário (em relação ao retículo da rede) com diferentes ângulos de deposição. Os ângulos são definidos em relação à reta normal da superfície do substrato inicialmente plano. A deposição de partículas em ângulos diferentes de zero produz um crescimento paralelo ao substrato. As posições das partículas são escolhidas aleatoriamente, representando o chamado Modelo de Deposição Aleatório (*Random Deposition*).

### Resultados e Discussão:

Os resultados das simulações forneceram as características essenciais das superfícies estudadas. Na figura 2, observa-se um corte transversal de uma superfície gerada por meio de simulação computacional.

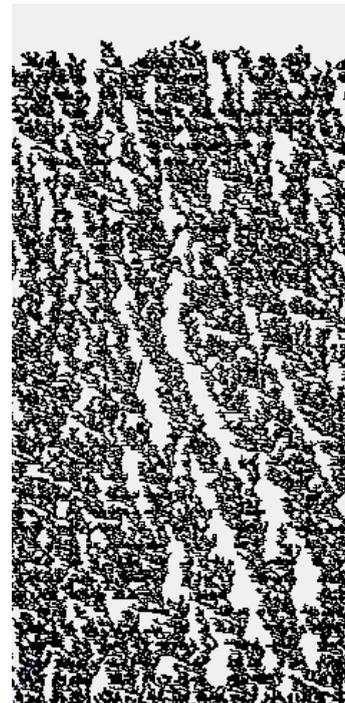


Figura 2- Corte transversal de uma superfície gerada por simulação computacional de partículas depositadas com o ângulo de 45° em relação ao substrato em (1+1) dimensões.

Por meio das simulações, obtivemos os resultados numéricos dos expoentes característicos  $\alpha$  e  $\beta$ . Na figura 3 observa-se que, quando se aumenta o ângulo de deposição das partículas, o valor de  $\beta$  varia de 0,50 a aproximadamente 0,30. No Modelo de Deposição Aleatória encontra-se exatamente o valor de  $\beta = 1/2$  para  $\theta = 45^\circ$ , enquanto o valor médio de 0,30 se aproxima ao valor de  $1/3$ , o valor exato obtido para outro modelo de

crescimento, o Modelo Balístico. Esse modelo incorpora o chamado crescimento lateral, ou seja, paralelo à superfície inicial do substrato, como observado nas simulações.

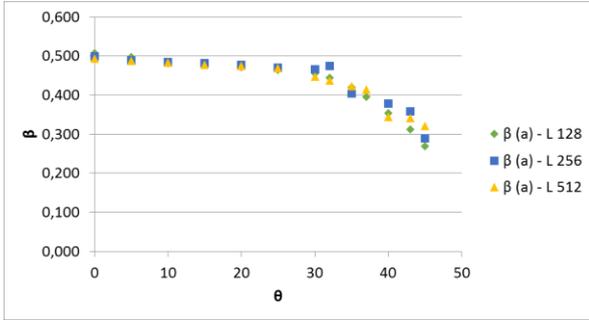


Figura 3 - Diferentes valores de  $\beta$  em função do ângulo de deposição  $\theta$  para diferentes tamanhos de redes.

Como o expoente  $\alpha$  corresponde à saturação da rugosidade, no ângulo  $0^\circ$ ,  $\alpha = 0$ , pois a rugosidade não satura. À medida que o tamanho da rede aumenta, tendendo ao infinito, por meio de regressão linear, obtivemos  $\alpha \approx 0,15$ , já que os expoentes são definidos para redes de tamanho infinito.

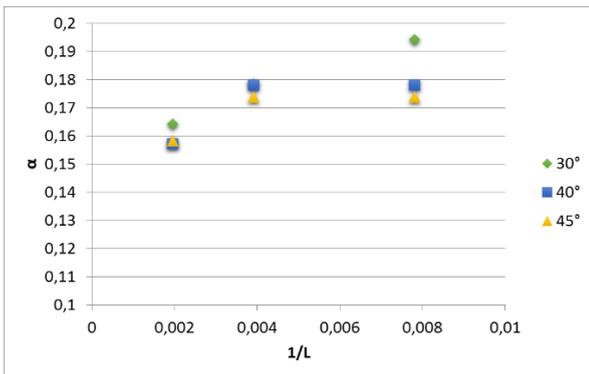


Figura 4 - Valores de  $\alpha$  em função do inverso do tamanho da rede para diferentes ângulos de deposição.

Pode-se analisar analiticamente este problema por meio de uma equação diferencial estocástica apropriada. A variação temporal da altura média é escrita como

$$\frac{\partial h(\vec{r}, t)}{\partial t} = F + S(f) \quad \text{Eq. 2}$$

onde  $F$  é o número médio de partículas depositadas em um sítio qualquer da rede e  $S(f)$  é um ruído do tipo rosa, na forma:

$$S(f) = (A + Bi)f^{-\gamma} \quad \text{Eq. 3}$$

onde  $A$  e  $B$  são constantes,  $i$  é a unidade imaginária,  $f$  a frequência do ruído e  $\gamma$  é um expoente entre 0 e 2.

Escolhendo apropriadamente os valores das constantes, e usando  $\gamma = 2/3$ , temos:

$$S(f) = \frac{(-1)^{5/6} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (\text{sgn}(f) - 1)}{\Gamma(\frac{1}{3}) f^{2/3}} \quad \text{Eq. 4}$$

onde  $\text{sgn}$  é a função sinal e  $\Gamma$  é a função gama. Aplicando a transformada inversa de Fourier, temos:

$$\mathcal{F}(S) = \varphi(\vec{r}, t) = C \frac{1}{t^{1/3}} + F \quad \text{Eq. 5}$$

onde  $t$  é o tempo e  $C$  e  $F$  são constantes arbitrárias. Integrando  $\varphi(\vec{r}, t)$  entre 0 e  $t$ , podemos escrever  $\langle h(\vec{r}, t) \rangle$  e  $\langle h^2 \rangle$  e  $\langle h^2 \rangle$ , de forma que

$$\langle h(\vec{r}, t) \rangle = Ft + \int_0^t \varphi(\vec{r}, t) dt = Ft^{2/3} \quad \text{Eq. 6}$$

e portanto,

$$\langle h^2 \rangle = F^2 t^{4/3}. \quad \text{Eq. 7}$$

Como podemos escrever a rugosidade como  $\omega^2(t) = \langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2$ ,

$$\omega^2(t) = C t^{2/3} \rightarrow \omega(t) = C t^{1/3} \quad \text{Eq. 8}$$

e por fim,  $\beta = 1/3$ .

Dessa forma, com a equação diferencial estocástica apresentada na Eq. 2, obtem-se o expoente da Deposição Balística para o modelo estudado.

### Conclusões:

Neste trabalho foram realizadas simulações computacionais de Deposição Aleatória (DA) de partículas com diferentes ângulos de deposição, bem como estudo analítico, por meio de uma equação diferencial estocástica que representa a evolução da superfície em questão.

Com o uso de simulações computacionais, o modelo de DA com ângulo de  $45^\circ$  recupera-se os resultados do modelo de Deposição Balística, para o expoente  $\beta$ . Nossos resultados analíticos corroboram as simulações. O expoente de saturação da rugosidade encontrado para o modelo é  $\alpha \approx 0,15$ , que difere do modelo de DA.

### Referências bibliográficas

A. Barabási, H. E. Stanley, Fractal Concepts in Surface Growth. Cambridge University Press, Great Britain, 1995.

F. D. A. A. Reis, Phys. Rev. E 73, 021605, (2006).

F. D. A. A. Reis, Phys. Rev. E 91, 062401 (2015).

F. Family, T. Vicsek, J. Phys. A 18, L75, (1985).

F. L. Forgerini and W. Figueiredo, Phys. Rev. E 79, 041602 (2009).

F. L. Forgerini and W. Figueiredo, Phys. Rev. E 81, 051603 (2010).

J. S. de O. Filho. Modelos competitivos de deposição de partículas. Viçosa – MG, 2012.

P. Meakin, Fractals, Scaling and Growth far from Equilibrium (Cambridge University Press, 1998)