

Modelagem de Formação de Estrutura Porosa Utilizando a Equação de KPZ

Mariana Pelissari Monteiro Aguiar Baroni
Reinaldo Roberto Rosa

Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada
Núcleo para Simulação e Análise de Sistemas Complexos
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE
E-mail: mariana@lac.inpe.br e reinaldo@lac.inpe.br

Antônio Ferreira da Silva

Instituto de Física
Universidade Federal da Bahia
Salvador – BA
E-mail: ferreira@venus.fis.ufba.br

Resumo

Devido à evolução recente das pesquisas na área de materiais porosos [2,4,5,9], há uma grande necessidade pelo estudo e desenvolvimento de modelos para simular a morfologia desses materiais. O interesse na dinâmica de formação da superfície de uma estrutura tem recentemente atraído a atenção de muitos cientistas pelo mundo todo. A aplicação tecnológica, principalmente na área da nanotecnologia, é o que tem motivado esses pesquisadores. O objetivo deste trabalho é implementar um modelo cujo resultado assemelha-se à superfície de estruturas porosas ativas^[2]. Neste trabalho, apresentamos os diferentes processos de crescimento (ênfase ao modelo contínuo usando a equação de KPZ) e sua correspondente classe de universalidade. Também apresentamos os resultados preliminares e próximos passos para a conclusão deste.

Palavras-chave: modelos de crescimento, deposição randômica, deposição balística, equação de KPZ, universalidade de classes

1. Introdução

Devido à evolução recente das pesquisas na área de materiais porosos [2,4,5,9], há uma grande necessidade pelo estudo e desenvolvimento de modelos para simular a morfologia desses materiais.

As possíveis aplicações tecnológicas em dispositivos óptico-eletrônicos, motivam a caracterização de padrões de estruturas no silício poroso. Além disso, esse material apresenta uma característica muito importante: a fotoluminescência, que possivelmente está associada com a natureza e forma de seus poros [3,4,9]. Muito esforço tem sido feito para compreender os mecanismos subjacentes deste comportamento, que é muito diferente do silício puramente cristalino (Si). De fato, empiricamente, sabe-se que, em geral, a fotoluminescência está relacionada com o nível de porosidade da amostra. Entretanto, a influência do tipo de

morfologia sobre a fotoluminescência e o processo de sua formação, ainda não são bem compreendidos [4].

Recentemente Da Silva et al [4] aplicaram a Análise de Padrões Gradientes (*Gradient Pattern Analysis* - GPA) em um conjunto de imagens de silício poroso obtidas através de *scanning force microscopy* (SFM) diferenciadas pelo nível de energia de absorção e nível de rugosidade.

Devido à sensibilidade do GPA para quantificar estruturas assimétricas em padrões complexos, este foi usado para caracterizar o silício poroso quantitativamente.

Eles mostraram que, para um conjunto de amostras, o GPA evidencia uma relação direta da assimetria estrutural com o nível de energia da amostra (associada à fotoluminescência).

O objetivo deste trabalho é implementar um modelo cujo resultado assemelha-se à superfície de estruturas porosas ativas^[2]. Para validar essa modelagem serão usados conceitos de relação de escala e o GPA, que serão aplicados nas imagens das amostras e no modelo matemático com a finalidade de comparar os resultados e conseqüentemente validar ou não o modelo.

Este artigo apresenta os primeiros resultados referentes ao estudo de modelos de crescimentos e validação dos algoritmos de simulação que foram feitos utilizando o software Matlab 6.5 e em um computador Pentium III, 260 KB e 300 MHz.

2. Modelos de Crescimentos

O interesse na dinâmica de formação da superfície de uma estrutura tem recentemente atraído a atenção de muitos cientistas pelo mundo todo. A aplicação tecnológica desse tipo de conhecimento, principalmente na área da nanotecnologia, é o que tem motivado esses pesquisadores. Nessa seção apresenta-se os diferentes processos de crescimento (discretos: DR e DB; e contínuos - KPZ) e sua correspondente classe de universalidade¹.

¹ Dois sistemas pertencem à mesma universalidade de classes se eles compartilham o mesmo conjunto de expoentes de escala. Isto significa que dois sistemas são descritos pela mesma equação de crescimento.

2.1. Modelo de deposição balística

A deposição balística (DB) foi introduzida como um modelo de agregados coloidais, e posteriormente estudos concentraram-se nas propriedades de agregados porosos gerados por esse modelo [1]. Este modelo é definido como (Figura 2.1): um elemento² é solto de uma posição escolhida aleatoriamente acima da superfície localizada a uma distância maior que a altura máxima da interface. O elemento segue uma trajetória vertical e ao encontrar a superfície³ e fixa-se. Quando este elemento encontra o substrato ou uma partícula vizinha, ele pára. Os elementos depositados formam um agregado com uma geometria muito particular que evolui no tempo.

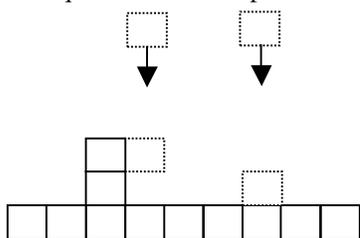


Figura 2.1: O modelo de DB.

A altura média da superfície, \bar{h} , é definida por [1,5]

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

onde $h(i,t)$ é a altura da coluna i no tempo t . Se a razão de deposição (número de partículas que chegam em um sítio) é constante, a altura média aumenta linearmente com o tempo:

$$\bar{h}(t) \sim t \quad (2)$$

As flutuações das alturas da superfície ou interface em relação ao comprimento L do sistema e o tempo de deposição, que caracteriza a rugosidade da superfície ou interface, é dada pela seguinte expressão [1,5]:

$$W(L,t) \equiv \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h(i,t) - \bar{h}(t)]^2} \quad (3)$$

Para monitorar o processo de rugosidade quantitativamente, medimos a largura da interface em função do tempo. Por definição, o crescimento começa de uma linha horizontal, a interface no tempo zero é uma linha reta, com largura zero [1].

Fazendo um gráfico simples, da evolução temporal da largura da superfície, é possível observar duas regiões separadas por um cruzamento no tempo t_x (Figura 2.2)

[1]:

i) inicialmente, a largura aumenta como uma potência do

² Elemento: estrutura elementar que pode ser depositada ou retirada do substrato para formação da superfície estruturada.

³ Superfície neste contexto é o conjunto de elementos no agregado que são mais altos em cada coluna.

tempo,

$$W(L,t) \sim t^\beta \quad [t \ll t_x] \quad (4)$$

O expoente β , que é comumente chamado de *expoente de crescimento* caracteriza a dinâmica temporal dependente do processo de rugosidade.

ii) o aumento da largura pela lei de potência não continua indefinidamente, mas é seguida por um regime de saturação que dura até alcançar um valor de saturação:

$$W_{sat}(L) \sim L^\alpha \quad [t \gg t_x] \quad (5)$$

O expoente α , que é comumente chamado de *expoente de rugosidade*, caracteriza a rugosidade da interface saturada.

iii) o cruzamento temporal t_x (algumas vezes chamado de tempo de saturação) depende do tamanho do sistema,:

$$t_x \sim L^z \quad (6)$$

onde z é chamado de *expoente dinâmico*.

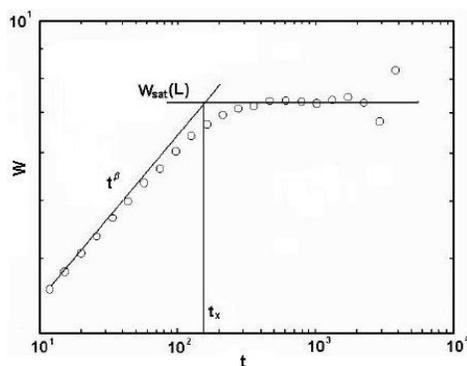


Figura 2.2: Evolução da rugosidade da superfície ao longo do tempo para o modelo de DB com $L=200$ (adaptado de [1]§4.2)

Os expoentes de escala α , β e z não são independentes [1,5]. Fazendo $W(L,t)/W_{sat}(L)$ em função do tempo resultará em curvas que saturam no mesmo valor, independentemente do tamanho do sistema L .

Fazendo a largura como uma função de t/t_x resultará em curvas com saturação de mesmas características temporais. Essas duas observações sugerem que $W(L,t)/W_{sat}(L)$ é uma função de t/t_x única, isto é

$$\frac{W(L,t)}{W_{sat}(L)} \sim f\left(\frac{t}{t_x}\right) \quad (7)$$

onde $f(u)$ é chamada "função de escala". Se substituirmos

$W_{sat}(L)$ e t_x por suas formas escalares teremos:

$$W(L,t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) \quad (8)$$

Esta relação é conhecida como *relação de escala de Family-Vicsek* [1].

Aproximando o ponto de cruzamento $(t_x, W(t_x))$ pela esquerda teremos, de acordo com (4), $W(t_x) \sim t_x^\beta$. E se aproximarmos pela direita teremos $W(t_x) \sim L^\alpha$, conforme (5). Dessas duas relações segue que $t_x^\beta \sim L^\alpha$. Daí por (6) temos:

$$z = \frac{\alpha}{\beta} \quad (9)$$

A equação (9), uma lei de escala ligando os três expoentes, é válida para algum processo de crescimento que obedece a uma relação de escala (8).

Uma importante característica do processo de crescimento do modelo de DB e que as correlações desenvolvem-se ao longo da superfície, o que implica que diferentes sítios da superfície não são completamente independentes, mas dependem das alturas em sítios vizinhos. Assim, o próximo elemento que chega a superfície fixa-se no primeiro vizinho do sítio mais próximo que encontrar. A altura desse novo elemento deverá ser igual ou maior que de seus vizinhos. As flutuações das alturas se espalharão lateralmente [5]. Embora o processo de crescimento é local, através desse crescimento lateral a ‘informação’ sobre a altura de cada um dos vizinhos espalha-se globalmente pela superfície [1,5].

2.2. Modelo de deposição randômica

A deposição randômica (DR - conhecida também como deposição aleatória) é o mais simples dos modelos de crescimento. Ele é definido como (Figura 2.4): de um sítio escolhido aleatoriamente sobre a superfície, um elemento cai verticalmente até encontrar o topo da coluna e em seguida é depositado.

O crescimento de cada coluna é independente e não há nenhum mecanismo que gera correlações ao longo da interface. Essa é a diferença fundamental entre a DR e a DB: a interface da DR não é correlacionada.

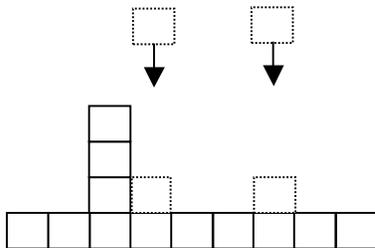


Figura 2.3: O modelo de DR

Fazendo o cálculo da solução exata para a DR, utilizando a probabilidade de crescimento de cada coluna e os dois primeiros momentos estatísticos [1], tem-se

$$\beta = \frac{1}{2}. \quad (14)$$

O modelo de DR permite que a interface cresça indefinidamente com o tempo, isto é, sem saturação. Como não há correlações no modelo de DR, a interface não satura e o expoente de rugosidade não é definido. Além disso, desde que as colunas não são correlacionadas, a interface não é auto-afim.

2.5. A equação de KPZ

A equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [6]

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = v\nabla^2 h + \frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2 + \eta(x,t) \quad (15)$$

é a equação de crescimento mais simples que descreve o processo de crescimento de uma interface, onde $h(x,t)$ é a altura de uma interface em uma posição do substrato x no tempo t ; $\eta(x,t)$ é o termo de ruído branco e v e λ são os parâmetros relacionados a tensão superficial e o crescimento lateral respectivamente. Essa equação é a primeira extensão da equação de Edwards-Wilkinson (EW) [1]. A equação de EW foi a primeira equação da continuidade linear usada para estudar o crescimento de interfaces por deposição de elementos. Adicionando termos não lineares a este tipo de equação, as propriedades de escala mudam. A equação de KPZ é capaz de explicar os valores dos expoentes obtidos para o modelo de DB [1].

2.5.1 Construção da equação de KPZ

A equação de KPZ inclui um termo não linear que na equação de EW não existe. Este termo não linear é necessário, pois inclui um crescimento lateral da interface na equação de crescimento. Para incluir o crescimento lateral na equação de crescimento, considera a adição de uma nova partícula à superfície. Assim, quando uma partícula é adicionada o crescimento ocorre localmente normal à interface, gerando um aumento δh ao longo do eixo h . Pelo teorema de Pitágoras tem-se (Figura 2.4):

$$\delta h = \left[(v\delta t)^2 + (v\delta t \nabla h)^2 \right]^{1/2} = v\delta t \left[1 + (\nabla h)^2 \right]^{1/2}. \quad (16)$$

Se $|\nabla h| \ll 1$ (distância pequenas entre os elementos) pode-se expandir (16),

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = v + \frac{v}{2}(\nabla h)^2 + \dots \quad (17)$$

sugerindo que o termo não linear da forma $(\nabla h)^2$ deve estar presente na equação de crescimento para refletir a presença do crescimento lateral.

2.5.2 Resolvendo a equação de KPZ

Para mostrar como o termo não linear é de fato relevante e afeta os valores do expoente de escala, a

$$(4.16)$$

equação de KPZ será resolvida usando argumentos de escala [1]. As transformações de escala

$$x \rightarrow bx \quad h \rightarrow b^\alpha h \quad t \rightarrow b^z t \quad (18)$$

transformam a equação (15) em

$$b^{\alpha-z} \frac{\partial h}{\partial t} = \nu b^{\alpha-2} \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} b^{2\alpha-2} (\nabla h)^2 + b^{-d/2-z/2} \eta \quad (19)$$

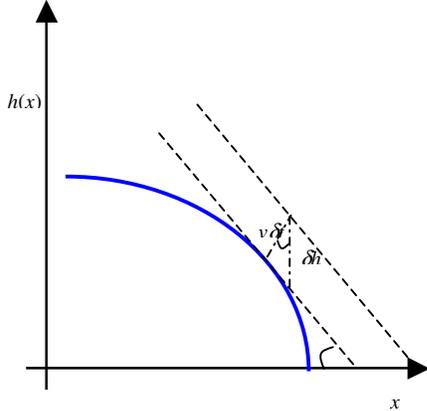


Figura 2.4: A origem do termo não linear na equação de KPZ.

Comparando $b^{\alpha-2} \nabla^2 h$ com $b^{2\alpha-2} (\nabla h)^2$, no limite $b \rightarrow \infty$, o termo não linear é dominante sobre o termo de tensão superficial, para $\alpha > 0$. Multiplicando a equação (19) por $b^{z-\alpha}$, obtém-se

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu b^{z-2} \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} b^{\alpha+z-2} (\nabla h)^2 + b^{-d/2+z/2-\alpha} \eta \quad (20)$$

Para garantir a invariância de escala, (20) deve ser independente de b . Entretanto, esse procedimento fornece três relações de escala para dois expoentes, α e z . Mas como o termo não linear domina sobre a tensão superficial, o termo $\nu \nabla^2 h$ pode ser negligenciado. Assim obtém-se

$$\alpha = \frac{(2-d)}{3}, \quad \beta = \frac{(2-d)}{(4+d)}, \quad z = \frac{(4+d)}{3} \quad (21)$$

Para este reescalonamento, quando $d=1$, tem-se $\alpha=1/3$, $\beta=1/5$ e $z=5/3$, que são diferentes dos resultados numéricos [1], $\alpha \sim 0.47$ e $\beta \sim 0.33$. A razão desses valores não coincidirem é que reescalando o sistema, os diferentes termos que aparecem na equação de crescimento (ν , λ e D) estão acoplados uns aos outros e não podem ser renormalizados independentemente. Assim, não pode-se assumir simplesmente que os expoentes de b são iguais a zero, desde que ν , λ e D também podem mudar sob reescala.

Para obter os expoentes de escala, utiliza-se a equação de Burgers que combinada com argumentos de escala resulta na relação entre os dois expoentes independentes:

$$\alpha + z = 2 \quad (22)$$

A equação (22) estabelece uma relação entre os dois expoentes desconhecidos α e $z = \alpha/\beta$ que caracterizam o crescimento. Essa relação de escala é válida para qualquer dimensão e os valores dos expoentes podem ser obtidos por conceitos de grupo de renormalização.

Em um substrato unidimensional, pelo teorema da flutuação-dissipação, obtém-se os seguintes valores para esses parâmetros [1]:

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad z = \frac{3}{2} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{1}{3} \quad (23)$$

Comparando com os resultados obtidos numericamente [1,5] para o modelo de DB, nota-se concordância entre os valores, sugerindo que a equação de KPZ e o modelo de DB pertencem à mesma universalidade de classes.

3. Resultados e Discussões Preliminares

3.1. Modelos discretos: DR e DB

3.1.1. Modelo de DR 1D

Um exemplo de simulação é a Figura 3.1. O tamanho do sistema é 10, a forma dos elementos depositados é circular, o tempo de deposição é 10 e a razão de deposição são 10 elementos por tempo. O tempo de simulação foi de 0.29 segundos.

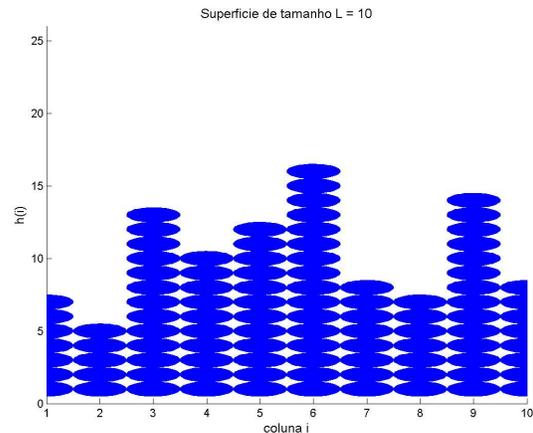


Figura 3.1: Deposição Randômica para um sistema de tamanho $L = 10$.

Sabe-se que para o modelo de DR, o valor do expoente de crescimento deve ser $\beta = 1/2$. Para validar o código da simulação, calcula-se o valor desse expoente graficando t versus W e calculando o coeficiente angular da reta da tendência dos dados. Para isso utilizou-se um sistema com tamanho $L = 200$, tempo de deposição $t = 1000$ e razão de deposição igual a 100 (Figura 3.2).

O valor obtido $\beta = 0.477$ (~ 0.5) valida o algoritmo de simulação para a DR 1D.

$$(4.47)$$

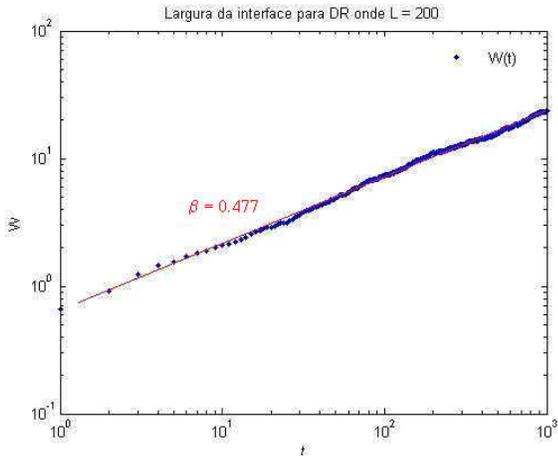


Figura 3.2: Evolução da rugosidade da superfície ao longo do tempo

3.1.2. Modelo de DR 2D

Um exemplo de simulação é a Figura 3.3. O tamanho do sistema é 5x5, a forma dos elementos depositados é uma esfera, o tempo de deposição é 10 e a razão de deposição são 25 elementos por tempo. O tempo de simulação foi de 0.03 segundos.

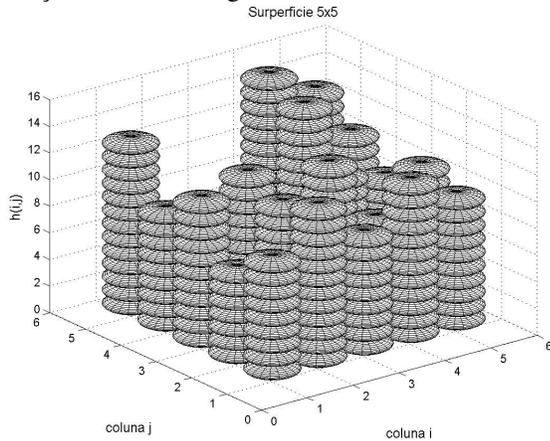


Figura 3.3: Deposição Randômica 2D em uma grade 5x5.

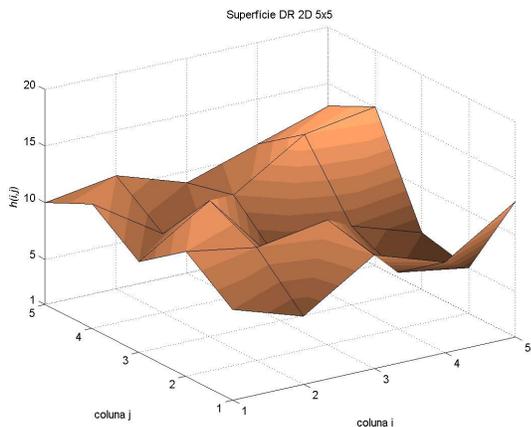


Figura 3.4: Superfície em $t = 10$ da DR da Figura 3.3.

Para o modelo de DR em 2D, o valor do expoente de crescimento deve ser também $\beta = 1/2$, pois não existe correlação entre as colunas e elas crescem independentemente.

Para validar o código da simulação 2D, procedeu-se da mesma maneira para o caso 1D com um sistema com a seguinte configuração: tamanho 50x50, tempo de deposição $t = 1000$ e razão de deposição igual a 2500 (Figura 3.5). Para mostrar o custo computacional, fez-se o cálculo do tempo de simulação que foi de 19.158 segundos.

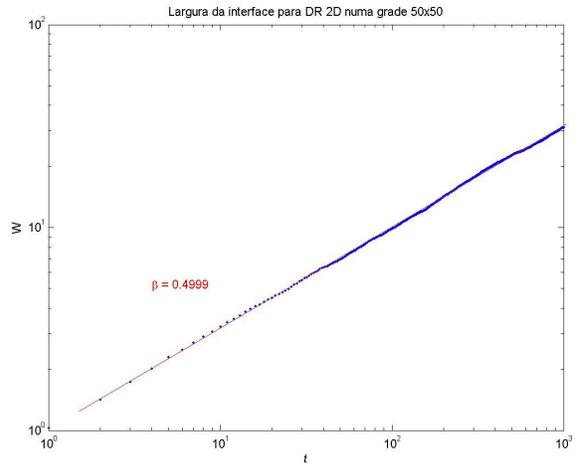


Figura 3.5: Evolução da rugosidade da superfície ao longo do tempo

O valor obtido $\beta = 0.499$ (~ 0.5) valida o algoritmo de simulação para a DR 2D.

3.1.3. Modelo de DB 1D

Exemplo de simulação desse tipo de deposição é a Figura 3.6 onde as configurações do sistema são as mesmas usadas para a DR. O tempo de simulação foi de 1.19 segundos.

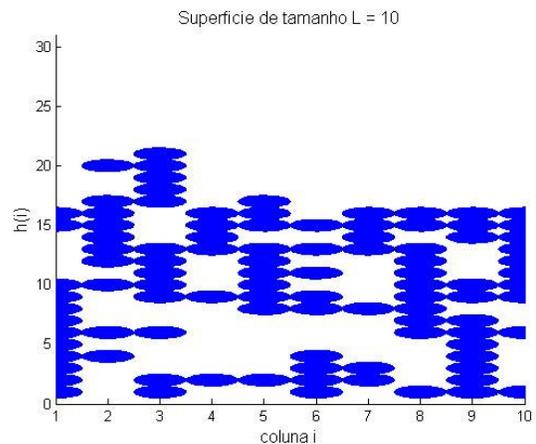


Figura 3.6: Deposição Balística para um sistema de tamanho $L = 10$.

Sabe-se que para o modelo de DB 1D, o valor do expoente de crescimento deve ser $\beta = 1/3$. Para validar o código da simulação, procedeu-se da mesma maneira que na DR: calcula-se o valor desse expoente graficando t versus W e calculando o coeficiente angular da reta de tendência dos dados. Para isso utilizou-se um sistema com tamanho $L = 300$, tempo de deposição $t = 10000$ e razão de deposição igual a 300 (Figura 3.7).

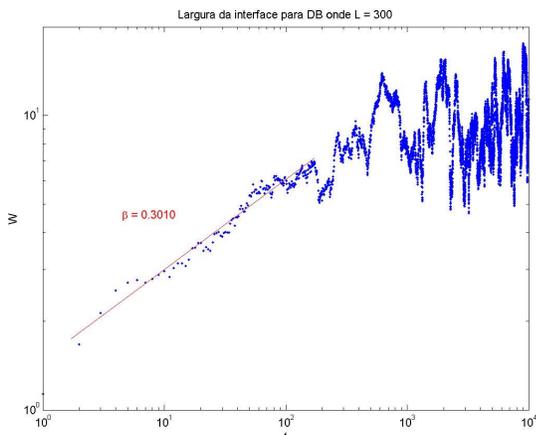


Figura 3.7: Evolução da rugosidade da superfície ao longo do tempo

O valor obtido $\beta = 0.3010$ (~ 0.33) valida o algoritmo de simulação para a DB 1D.

3.1.4. Modelo de DB 2D

Um exemplo de simulação é a Figura 3.8. O tamanho do sistema é 5×5 , a forma dos elementos depositados é uma esfera, o tempo de deposição é 10 e a razão de deposição são 25 elementos por tempo. O tempo de simulação foi de 1.051 segundos.

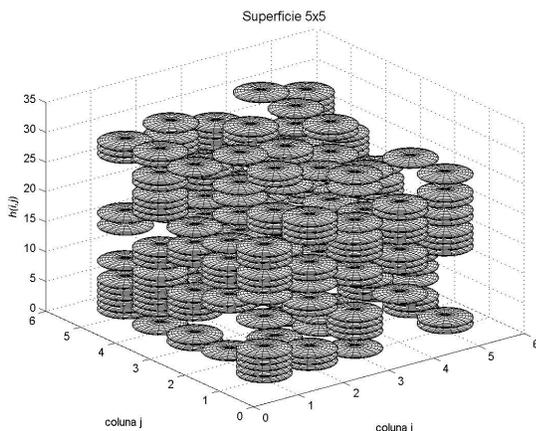


Figura 3.8: Deposição Balística 2D em uma grade 5×5 .

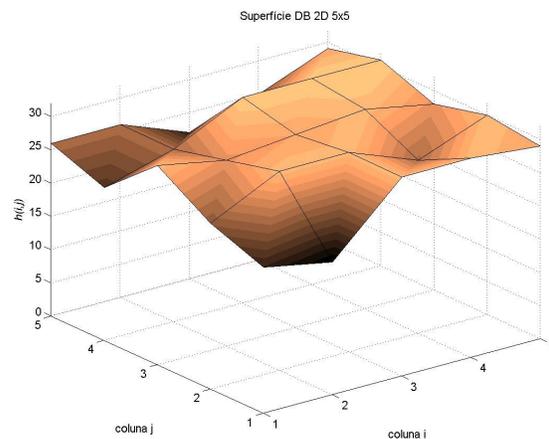


Figura 3.9: Superfície em $t = 10$ da DB da Figura 3.8.

Para o modelo de DB 2D, não se tem um valor exato para o expoente de crescimento. Mesmo assim fez-se o gráfico t versus W e calculou-se o expoente de crescimento, β , utilizando um sistema com tamanho 10×10 , tempo de deposição $t = 1000$ e razão de deposição igual a 20 (Figura 3.10). Para superfícies completamente não correlacionadas, como uma deposição aleatória, $\beta = 0.5$ e para modelos de crescimento contínuo que descrevem um sistema correlacionado, encontra-se $\beta = 1/4$.

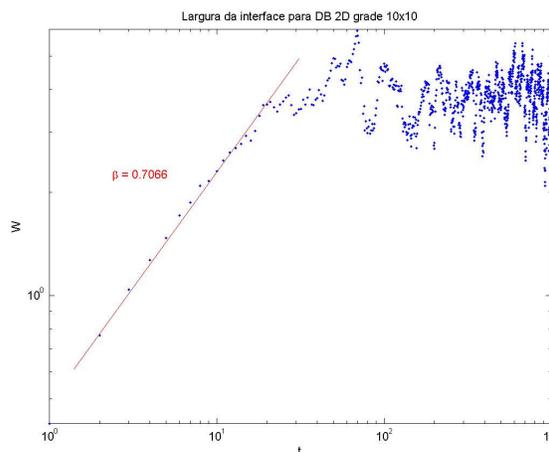


Figura 3.10: Evolução da rugosidade da superfície ao longo do tempo

O valor obtido $\beta = 0.71$ sugere que, para essa configuração do sistema, o processo de deposição balística pode ser descrito por um modelo fracamente correlacionado.

3.2. Modelo contínuo: A equação de KPZ

3.2.1 Modelo 1D

Para esse trabalho, usou-se a seguinte integração numérica da equação de KPZ, dada por Barabási et al [1]:

$$h(x, t + \Delta t) = h(x, t) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left[v(h(x + \Delta x, t) - 2h(x, t) + h(x - \Delta x, t)) + \left(\frac{\lambda}{8} \right) (h(x + \Delta x, t) - h(x - \Delta x, t))^2 \right] + \sqrt{2D \frac{\Delta t}{\Delta x}} \eta(x, t) \quad (24)$$

Os números randômicos η são uniformemente distribuídos entre $-1/2$ e $1/2$.

Como esse trabalho ainda está em desenvolvimento, os primeiros teste do algoritmo de simulação usaram a seguinte configuração do sistema: $L = 300$ é o tamanho do sistema, $\Delta x = 1$; $\Delta t = 0,001$; $v = 1$ (tensão superficial), $\lambda = 1$ (termo de crescimento lateral), e $D = 1$ (difusão superficial).

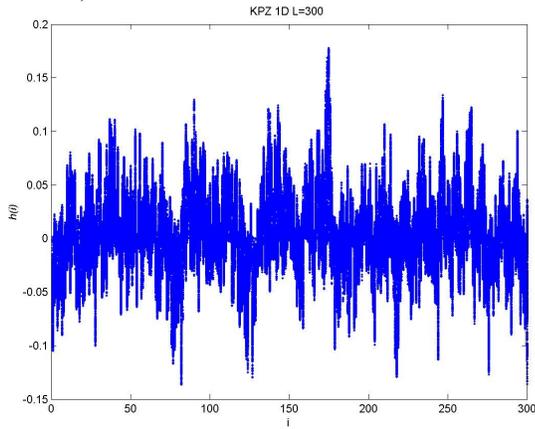


Figura 3.11: KPZ 1D para um sistema de tamanho $L=300$

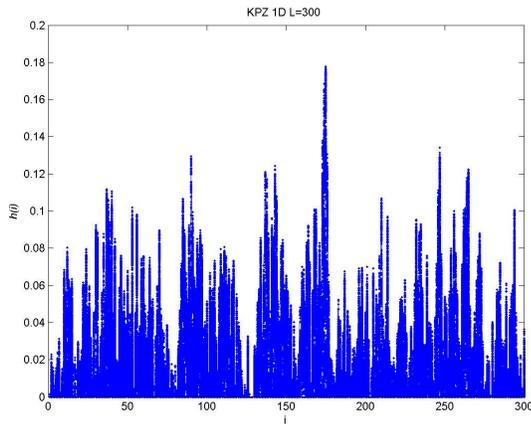


Figura 3.12: KPZ 1D para um sistema de tamanho $L=300$ (valores positivos)

Para o modelo utilizando a equação de KPZ 1D, o valor do expoente de crescimento deve ser $\beta = 1/3$ conforme (23). O valor encontrado na simulação $\beta \sim 0.5$ (Figura 3.13) indica que para essa configuração do sistema ($v = 1, \lambda = 1, D = 1$) o sistema é altamente não-correlacionado.

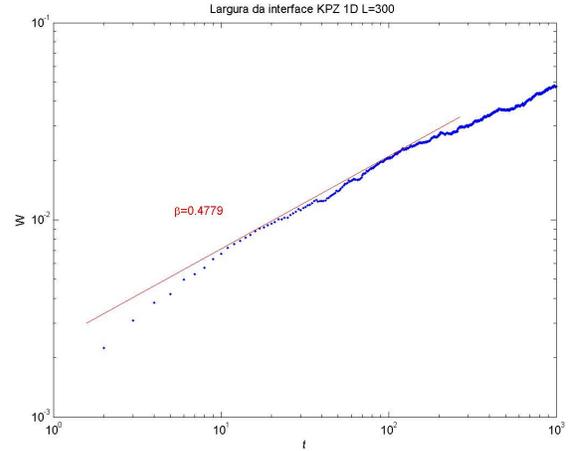


Figura 3.13: Evolução da rugosidade da superfície ao longo do tempo

Para investigar a dominância do comportamento não linear da equação, faz-se a mesma simulação mudando a configuração para $\lambda = 0$ (equação de EW).

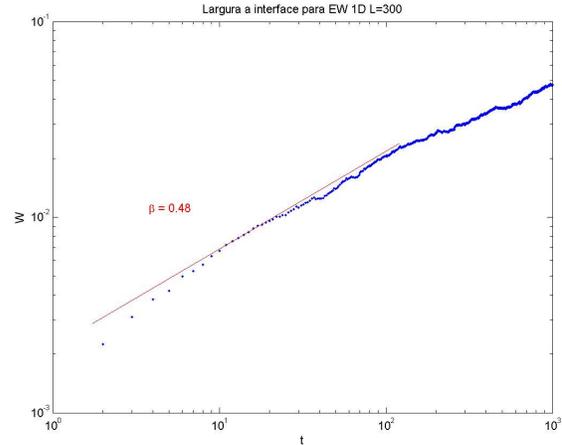


Figura 3.14: Evolução da rugosidade da superfície ao longo do tempo

Para essa configuração do sistema, o valor do expoente de crescimento ($\beta \sim 0.5$) sugere que quando $\lambda = 1$, o comportamento linear sobressai sobre o comportamento não-linear, indicando que esses parâmetros podem modelar superfícies fracamente correlacionadas ($\beta = 0.48 \sim 0.5$).

3.2.2 Modelo 2D

Para esse trabalho, foi proposta a seguinte integração numérica da equação de KPZ:

$$\begin{aligned}
h(x, y, t + \Delta t) = & h(x, y, t) + \\
& + v \Delta t \left[\frac{(h(x + \Delta x, y, t) - 2h(x, y, t) + h(x - \Delta x, y, t)))}{(\Delta x)^2} + \right. \\
& \left. + \frac{(h(x, y + \Delta y, t) - 2h(x, y, t) + h(x, y - \Delta y, t)))}{(\Delta y)^2} \right] \\
& + \left(\frac{\lambda}{8} \right) \Delta t \left[\frac{(h(x + \Delta x, y, t) - h(x - \Delta x, y, t))^2}{(\Delta x)^2} + \right. \\
& \left. + \frac{(h(x, y + \Delta y, t) - h(x, y - \Delta y, t))^2}{(\Delta y)^2} \right] \\
& + \sqrt{2D \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y}} \eta(x, y, t)
\end{aligned} \tag{25}$$

A configuração do sistema é a mesma para o modelo KPZ 1D: os números randômicos η são uniformemente distribuídos entre $-1/2$ e $1/2$, $L = 10$ é o tamanho do sistema, $\Delta x = 1$, $\Delta y = 1$, $\Delta t = 0,001$; $v = 1$ (tensão superficial), $\lambda = 1$ (termo de crescimento lateral), e $D = 1$ (difusão superficial).

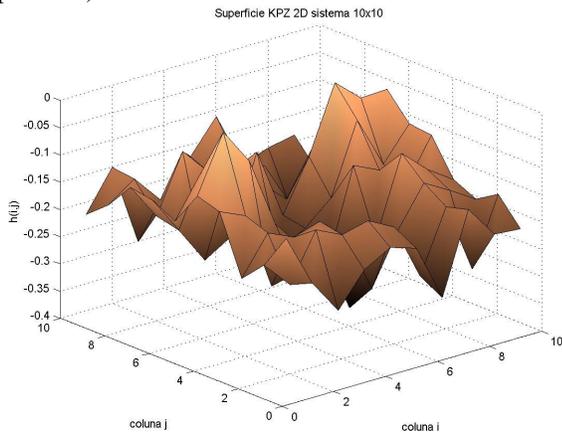


Figura 3.15: Superfície KPZ 2D para um sistema $L=10$.

Para o modelo utilizando a equação de KPZ – 2D, não há um valor exato do expoente de crescimento. Na literatura encontra-se o valor aproximado obtido através de simulações numéricas, $\beta \sim 0.25$. O valor encontrado na simulação, $\beta \sim 0.3$ (Figura 3.16), indica que para essa configuração do sistema ($v = 1, \lambda = 1, D = 1$) ele é correlacionado.

4. Considerações Finais

Como este trabalho ainda está em desenvolvimento, nesta seção abordaremos os tópicos a serem realizados para a conclusão deste.

Através do cálculo dos expoentes de crescimento foi possível validar os algoritmos que foram implementados. Como, o principal objetivo deste trabalho é simular uma superfície que apresente características estruturais semelhantes às superfícies das amostras, os próximos

passos serão obter o expoente de rugosidade (α) das simulações e validar os modelos com relação a este, obter os expoentes críticos das amostras de silício poroso (expoente de crescimento, rugosidade e dinâmico) e comparar com os obtidos na simulação, encontrar os parâmetros que ajustem o modelo com relação às amostras, e aplicar a Análise de Padrões Gradientes nas superfícies obtidas através de simulação e das amostras validando a modelagem com relação à fragmentação assimétrica das amplitudes.

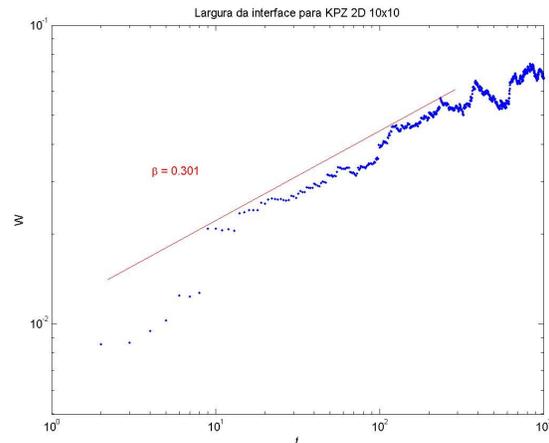


Figura 3.16: Evolução da rugosidade da superfície ao longo do tempo

5. Referências

- [1] Barabási, A. L.; Stanley, H. E. *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University Press, 1995.
- [2] Brito, Rogério de Carvalho; *Desenvolvimento de ambiente "Flyby" para análise de padrões gradientes com aplicação ao estudo de amostras de silício poroso*. São José dos Campos. Dissertação (Mestrado em Computação Aplicada) – INPE, 2004.
- [3] Canham, L. T.; "Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers." *Applied Physics Letters*, v. 51, n. 10, p. 1046-1048, Set. 1990
- [4] Da Silva, A. F.; Rosa, R. R.; Roman, L. S.; Veje, E. & Pepe, I. "Characterization of asymmetric fragmentation patterns in SFM images of porous silicon." *Solid State Communications*, v.113, p.703-708, 2000.
- [5] Dotto, M. E. R. *Universalidade e leis de escalas em amostras de silício atacadas quimicamente*. Tese. UNICAMP, 2003.
- [6] Kardar, M.; Parisi, G. & Zhang, Yi-C. "Dynamic Scaling of Growing Interfaces." *Physical Review Letters*, v. 59, n. 9, p. 889-892, Mar 1986.
- [7] Reis, F. D. A. A. "Deepening Transitions in Interface Growth Models." *Brazilian Journal of Physics*, v. 33, n. 3, p. 501-513, Sep 2003.
- [8] Rosa, Reinaldo R.; Sharma, A. S. & Valdivia, J. A. "Characterization of Asymmetric Fragmentation Patterns in Spatially Extended Systems." *International Journal of Modern Physics C*, v. 10, n. 1, p. 147-163, 1999.
- [9] Rosa, R. R.; Da Silva A. F.; Baroni, M. P.M.A.; Brito, R. C.; Pepe, I.; Roman, L. S.; Ramos, F. M.; Ahuja, R. & Persson C. "Structural Flyby Characterization of Nanoporosity." *Physics Status Solidi (c)*, v.1, n. s2, p. s277-s281, Jun 2004.

