

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

ESTUDOS COMPUTACIONAIS DE CRESCIMENTO DE SUPERFÍCIES E
FILMES FINOS POR DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS NANOMÉTRICAS

Bolsista: Deane Alves de Souza, FAPEAM

COARI-AM
2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO FINAL
ESTUDOS COMPUTACIONAIS DE CRESCIMENTO DE SUPERFÍCIES E
FILMES FINOS POR DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS NANOMÉTRICAS

Bolsista: Deane Alves de Souza, FAPEAM
Orientador: Prof. Dr. Fabrício Luchesi Forgerini

COARI-AM
2015

RESUMO

Mais dados reais estão sendo usados para o aprimoramento dos modelos de deposição estudados. Os modelos computacionais de superfície e filmes finos têm sido usados ultimamente para fazer a ligação entre experimentos computacionais e fenômenos físicos. Mediante ao uso de tecnologia computacional para simulação de crescimento de superfície, podem ser coletadas diversas informações usadas em diferentes áreas do conhecimento. Novos dados são inseridos nos processos de simulação do modelo, em que a rugosidade é um elemento importante para a sua classificação, onde vemos que a mesma apresenta dois aspectos: um regime de crescimento e outro de saturação. Usamos a rugosidade para fazer comparações entre experimentos e modelos computacionais. Nossos resultados experimentais de deposição de Cfx / CF4 (Tetrafluorometano) para revestimento de superfícies podem ter bastante interesse em aplicação médias.

Palavras chave: simulações computacionais, superfícies e interfaces.

SUMÁRIO

1. RESUMO.....	3
2. INTRODUÇÃO.....	5
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
4. MÉTODOS UTILIZADOS.....	7
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	8
6. CONCLUSÕES	12
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	12
8. CRONOGRAMA EXECUTADO.....	13

2. INTRODUÇÃO

Neste relatório temos o resultado final do projeto de Iniciação Científica em Física, tendo como tema central os estudos computacionais do crescimento de superfícies e filmes finos por deposição de partículas nanométricas, onde constam os resultados alcançados com base nos resultados apresentados anteriormente.

No transcorrer do projeto foram estudados alguns problemas relacionados com simulações de superfície e filmes finos por meio de simulações computacionais. Aplicação dos geradores de sequências de números aleatórios, desenvolvido um modelo utilizando características mais gerais dos modelos conhecidos. O tamanho das partículas é definido por uma distribuição gaussiana, e a posição onde as partículas são depositadas é sorteada aleatoriamente. Novos modelos criados baseados nas mais variadas aplicações, sendo propostos e estudados com o uso de algoritmos apropriados e cálculos numéricos. Os resultados aqui apresentados, de forma geral, tem uma combinação de modelos de deposição, representando assim as características físicas essenciais de um problema de interesse físico.

Foi desenvolvido um modelo utilizando características mais gerais dos modelos conhecidos, onde consideramos partículas de diferentes tamanhos, sendo depositadas em uma superfície unidimensional ou bidimensional, sem possibilidade de difusão das partículas. O tamanho das partículas é definido por uma distribuição gaussiana, e a posição onde as partículas são depositadas é sorteada aleatoriamente.

3. REVISÃO DA LITERATURA

A área da física relativa aos processos termodinâmicos fora do equilíbrio é bastante complexa e extensa, não tendo até o presente momento uma teoria bem fundamentada, como temos para o caso dos processos termodinâmicos em equilíbrio. Por esta razão, inúmeros problemas são estudados somente através de teorias aproximadas e de simulações numéricas assistidas por computador. Grandes partes destes problemas estudados apresentam enorme interesse tecnológico por serem possíveis de aplicações comerciais.

Quando estudamos a dinâmica que envolve os processos de física fora do equilíbrio, como no caso do crescimento de filmes finos, podemos considerar inúmeros fatores e aspectos dos processos que são extremamente complexos, o que nos permite estudar de forma simplificada, ou até mesmo tentar simplificar, estes problemas complexos chegando a um certo ponto, tornando-o possível de ser compreendido e tratado matematicamente.

Em decorrência desses conhecimentos são possíveis estudar vários problemas somente utilizando as teorias aproximadas e de simulações numéricas assistidas por computador. A maioria dos problemas estudados apresentam de alguma forma um enorme interesse tecnológico por proporcionar possíveis aplicações comerciais e desenvolvimento de novos produtos.

Aprimoramento de modelos desenvolvidos pela inclusão de parâmetros de difusão das partículas na superfície. Além do estudo de métodos de cálculo numérico que são necessários para todas as etapas de desenvolvimento do projeto (BETTS, 2001), devemos estudar as equações diferenciais que regem os modelos contínuos estudados (BARABÁSI; STANLEY, 1995).

Os estudos teóricos vem apresentando grande volume de publicações e proporcionando enorme interesse de pesquisadores na área (SANTOS et al., 2002; KARMAKAR et al., 2005; REIS, 2006; FORGERINI, 2009, 2010, 2011). Do ponto vista teórico, a mecânica estatística procura encontrar as características fundamentais que descrevem o comportamento desses sistemas tão complexos.

Em relação às questões mais técnicas de simulação, um certo cuidado deve ser tomado a medida que simulamos grandes sistemas de forma que o compilador possa reservar memória de maneira adequada, (MONTENEGRO; FERNANDO, 1994). Em dimensões maiores ($d > 2$), tempo de simulação pode aumentar significativamente, podendo, para grande valores de L , chegar a horas, dias ou mesmo semanas, para várias médias de várias amostras. Nas simulações realizadas nesse projeto, os maiores tempos

de simulações realizadas foram da ordem de uma semana, para diversas amostras do modelo estudado.

Investigar os aspectos dinâmicos dos processos de crescimento de superfícies, especialmente aqueles relacionados com a eletrodeposição química. Nos chamados modelos de crescimento aleatório (MEAKIN, 1998) e balístico (BARABÁSI; STANLEY, 1995) ou combinação de ambos (NEWMAN; BARKEMA, 1999). Nestes casos, procura-se determinar leis de escalas gerais que envolvem os parâmetros apropriados, com a dimensão espacial, comprimentos de correlação característicos e o tempo.

Nos modelos apresentados, L determina o tamanho da rede em questão e d a dimensão dessa rede. Procuramos sempre encontrar características como a rugosidade da superfície (definida por w), a altura de uma determinada posição na rede (definida por h), a porosidade do volume formado (definida por P) e como essas grandezas variam com o tempo. O tempo utilizado é definido como um passo de Monte Carlo, ou seja, o tempo necessário para se tentar depositar L partículas na rede no caso unidimensional (JAMSA; KLANDER, 1999; HARBISON; STEELE, 1991). É possível inicializar matrizes multidimensionais e neste caso é necessário especificar todas as dimensões menos a primeira para que o compilador possa reservar memória de maneira adequada. (MONTENEGRO; FERNANDO, 1994) A primeira dimensão somente especifica quantos elementos o vetor irá armazenar e isto lendo a inicialização o compilador pode descobrir.

4. MATERIAIS E MÉTODOS

A pesquisa ocorreu fundamentada na leitura do referencial teórico, materiais bibliográficos e os conhecimentos adquiridos nas fases anteriores da pesquisa que, durante todo o processo, serviu de alicerce para as etapas seguintes e para os resultados alcançados. Para isso, foram usados os conhecimentos dos conceitos básicos da linguagem de programação científica C++ e da utilização do método de Monte Carlo.

Depois de adquiridos os conhecimentos dos métodos de Monte Carlo, como é uma técnica baseada no uso de números aleatórios, são precisas várias realizações para se obter um valor aproximado, esse recurso de várias realizações, depende de muito tempo de recurso computacional. A linguagem de C++ é um pequeno núcleo de funções e estrutura básica, capaz de desenvolver programas altamente eficientes, pequenos e velozes.

No decorrer das atividades foram aprimorados os estudos de comandos básicos da linguagem computacional, bem como foram desenvolvidas rotinas simples desses aprimoramentos. Foram feitos alguns programas básicos de entrada e saída de dados,

tomando contato com a área técnica de simulação, leitura de artigos científicos da área e alguns métodos numéricos que foram necessários em todas as etapas do desenvolvimento do projeto.

Por fim, foram aprimorados os estudos dos processos relativos ao crescimento de superfícies e a evolução de interfaces, em função do tempo e das dimensões espaciais do modelo proposto em estudo, criando computacionalmente um modelo de deposição que deve combinar as características dos modelos de deposição aleatória com o modelo basílica.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Uma breve descrição dos conceitos de escala e definições de parâmetros que são estudados nos modelos de crescimento. Inicialmente o estudo das propriedades do modelo desenvolvido onde teve com foco principal na rugosidade de superfície e na sua evolução temporal, de modo que várias simulações foram feitas para diferentes configurações e tamanhos de rede diferentes sendo possível obter melhores resultados, para depósitos com partículas de apenas um tamanho. O que foi observado é que o comportamento é essencialmente o mesmo, sendo que a porosidade satura com o tempo, porém seu valor de saturação depende do tamanho da partícula depositada.

A rugosidade da superfície é definida pela largura da interface formada, ou seja, uma média quadrática das flutuações na altura:

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

onde a altura média é

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

sendo que a altura é uma função da posição na rede e do tempo:

$$h = h(i, t), \quad i = 1, \dots, L, \quad t \geq 0.$$

Nos instantes iniciais, quando a rugosidade apresenta um crescimento como uma lei de potência, temos que:

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

onde o expoente β é o chamado de expoente de crescimento. Já no regime de saturação, a largura de interface apresenta uma dependência como:

$$w(L) \sim L^\alpha \quad (t \gg t_x),$$

onde α é chamado de expoente de rugosidade, sendo o segundo expoente crítico. O tempo t_x geralmente é conhecido como tempo de saturação e os expoentes α e β não são independentes, estão correlacionados. Nos resultados obtidos o valores de α tiveram pequenas diferenças de um resultado para o outro.

Aprimoramentos de novas técnicas de programações computacionais com base nos conhecimentos e resultados já obtidos, criando novos dados que foram analisados obtendo excelentes resultados. Aperfeiçoamento dos conhecimentos e conceitos de programação científica c++, as características e funcionalidades de números aleatórios, usados pra desenvolver novas técnicas, tendo como foco principal as funções dos números aleatórios, de modo que foram feitas varias modelos de programas obtendo excelentes resultados.

Os resultados aqui apresentados são valores médios de muitas simulações realizadas, de modo que assim é possível diminuir o erro nas medidas que foram realizadas, tentando reproduzir o ensemble estatístico. Na tabela abaixo o tempo é definido como um passo de Monte Carlo, foram depositadas partículas com tamanhos iguais para determinado tamanho de rede.

No resultado apresentado, **L** determina o tamanho da rede em questão, **N** a dimensão das partículas depositadas e **A** o valor de alfa (α).

L	N	A
256	N=2; M=2	0.474
256	N=3; M=3	0.433
256	N=4; M=4	0.400
512	N=2; M=2	0.474
512	N=3; M=3	0.435
512	N=4; M=4	0.402
1024	N=2; M=2	0.477
1024	N=3; M=3	0.438
1024	N=4; M=4	0.411

Tabela 1: resultados do expoente de saturação para diferentes valores de L e de N e onde M representa o tamanho médio das partículas depositadas.

Para os diferentes tamanhos de rede, os valores de alfa foram diferentes, com diferença pequena para dimensão 2 como podem-se ser observado na tabela acima, visto que o tempo de simulação para essas redes é bem menor e assim podemos realizar médias calculadas sobre mais amostras. Dessa forma, como pode ser vista na figura 1, a

rugosidade cresce nos tempos iniciais e satura após certo tempo (com expoente $\alpha = 0.474$), para uma rede de tamanho $L=256$ e isso ocorre para os demais tamanhos de redes e partículas apresentadas. Já no gráfico da figura 3, onde a rede é bem maior com $L=1024$, a evolução temporal da rugosidade apresenta muito mais ruídos do que o caso anterior, sendo assim preciso realizar diversas outras simulações para ser possível chegar a um comportamento mais definido.

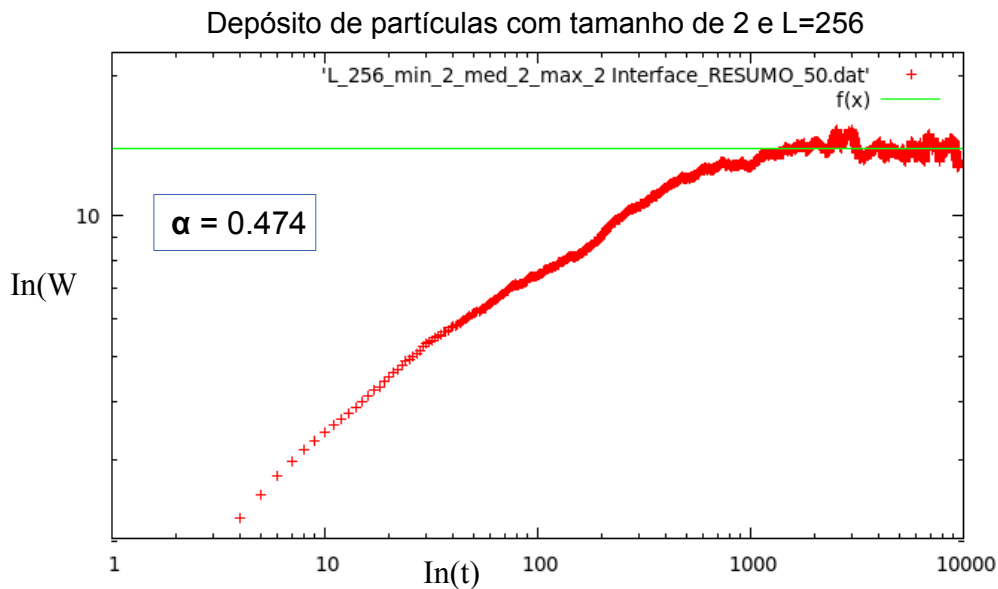


Figura 1: Logaritmo da rugosidade em função do logaritmo do tempo. A reta em verde defini o valor do expoente de saturação para os tempos finais.

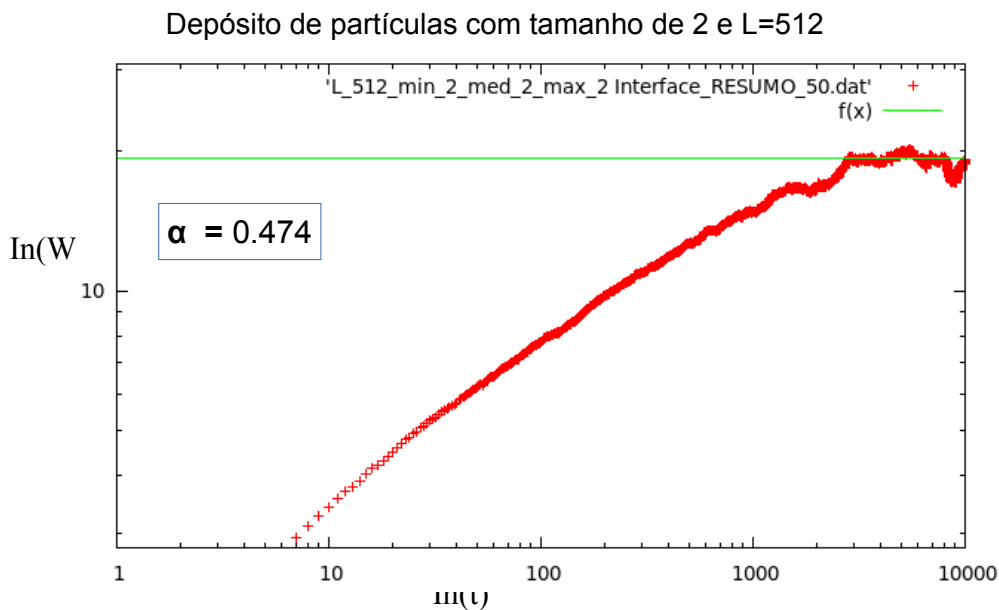


Figura 2: saturação em função do tempo para uma rede com tamanho $L=1024$ e partículas de tamanho $N=2$

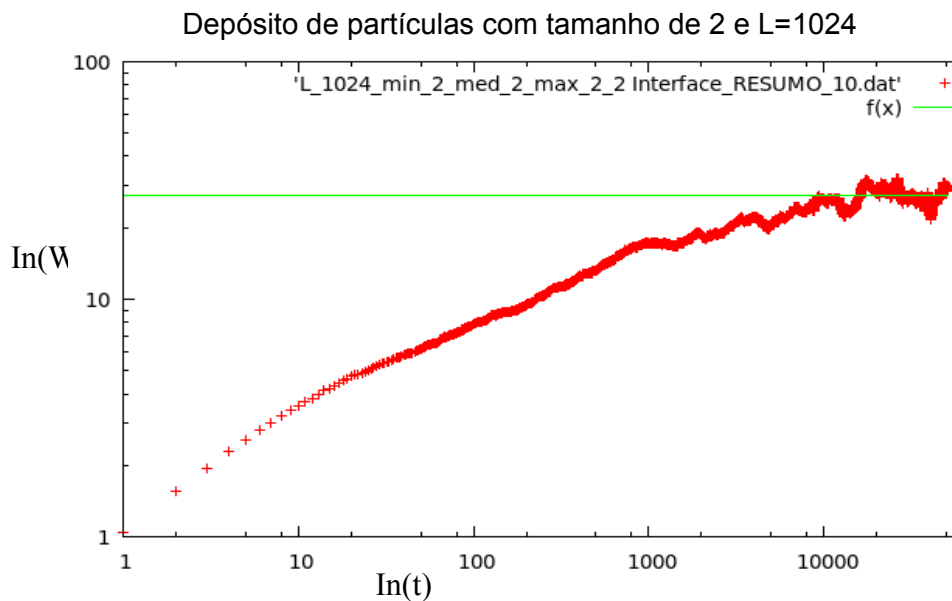


Figura 3: Mais flutuações e ruído podem ser observados.

Para simulações de tamanhos de rede menores é necessário um menor tempo de simulação e um maior número de medidas para obter um bom valor médio, os melhores resultados obtidos foram para as menores redes simuladas. Foram realizadas simulações para redes de tamanhos $L = 256, 512$ e 1024 .

Para estudar melhor esse comportamento, foram realizadas diversas simulações para depósitos com partículas de apenas um tamanho. O que foi observado é que o comportamento é essencialmente o mesmo, sendo que a porosidade satura com o tempo. Porém seu valor de saturação depende do tamanho da partícula depositada, como pode ser observados nos gráficos das figuras 1, 2 e 3.

No decorrer das simulações podemos observar que tanto a porosidade quanto a rugosidade de superfície, apresentam saturação com o tempo. Também foi possível observar que a rugosidade depende do tamanho da rede, enquanto a porosidade independentemente do tamanho da rede cresce com o tamanho da partícula depositada.

6. CONCLUSÕES

Ao longo do desenvolvimento deste projeto de pesquisa discutimos e usamos o método de Monte Carlo como base para as simulações das superfícies criadas nas deposição de partículas e suas evoluções temporais. Simulações foram feitas para calcular as médias da rugosidade e a evolução temporal da porosidade comparando com dados experimentais.

Apresentamos nossos valores das medidas obtidas, e podemos observar que tanto a largura de interface (rugosidade) quanto a porosidade apresentam saturação com o tempo. Apesar da saturação de superfície variar com o tamanho da rede onde as partículas são depositadas, nossos resultados mostram que a porosidade formada nos depósitos também satura depois de um período inicial de tempo e seu valor de saturação independe do tamanho da rede.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1]. BARABASI, A.-L; STANLEY, H.E. Fractal Concepts in Surface Growth. Cambridge : University Press, Cambridge (1995).
- [2]. FORGERINI, F.; FIGUEIREDO, W. Random deposition of particles of different sizes. Physical Review p. 041602. 2009.
- [3]. FORGERINI, F.; FIGUEIREDO, W. Thin-film growth by random deposition of Irod-like particles on a square lattice. Physical Status Solidi C 8, n. 11, p. 3119, 2011.
- [4]. MONTENEGRO, FERNANDO; PACHECO, ROBERTO: "Orientação a Objetos em C+", Ed. Ciência Moderna, Rio de Janeiro, 1994.
- [7]. FORGERINI, F.; FIGUEIREDO, W. Thin-film growth by random deposition of linear polymers on a square lattice. Physical Review E n. 81, p. 051603, 2010.
- 10]. HARBISON, S. P.; STEELE, G.; C: A Reference Manual, 3a edição. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-hall, 1991.

