

DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS EM SUBSTRATO UNIDIMENSIONAL COM DIFUSÃO

Josias Carvalho¹, Edio Cunha da Costa²

¹ Acadêmico do Curso de Licenciatura em Física do CCT, bolsista PIVIC/UDESC.

² Orientador, Departamento de Física do CCT – edio.costa@udesc.br.

Palavras-chave: Deposição. Difusão. Estatística.

OBJETIVO

O estudo do crescimento de filmes finos é de grande interesse tecnológico e tem aumentado consideravelmente nos últimos anos. Tal estudo permite obter diversas propriedades físicas macroscópicas a partir das propriedades microscópicas. Além da inserção do acadêmico na comunidade científica, o objetivo do presente trabalho é propor um modelo de crescimento de filme que se aproxime ao máximo da realidade dos fenômenos físicos observados na natureza.

METODOLOGIA

Utilizamos simulações computacionais (método de Monte Carlo) a fim de obter as grandezas físicas que caracterizam o crescimento do filme, como a altura média e a rugosidade, a partir de um modelo proposto. Os algoritmos foram escritos em linguagem de programação FORTRAN.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

A partir da leitura e análise de artigos científicos da área [1,2,3], foi proposto um modelo de deposição semelhante ao de Horowitz, Claudio Et al. [3], no qual foram modificadas algumas características para estudar e comparar os resultados obtidos. O modelo estudado descreve a deposição de partículas utilizando-se de outros dois modelos mais fundamentais, o Random Deposition Surface Relaxation (RDSR) e o Random Deposition (RD), sendo que as regras destes modelos foram obedecidas para proceder com a deposição das partículas.

O modelo mais simplificado para descrever a deposição de partículas sobre um substrato é o RD, que é caracterizado pela ausência de difusão das partículas sobre o substrato. Neste modelo uma partícula é lançada sobre o substrato e poderá ser adsorvida em qualquer um dos sítios da rede de dimensão L , com igual probabilidade, respeitando as condições de contorno pré – estabelecidas. Conforme as partículas são depositadas, ocorre o crescimento de um filme sobre o substrato, pois as partículas podem ser adsorvidas umas sobre as outras. No entanto, estas partículas ocupam apenas a área delimitada por cada sítio sem que haja qualquer interação entre seus vizinhos. Foi utilizado o Método de Monte Carlo para simular o crescimento do filme e a cada unidade de tempo (passo de Monte Carlo – MCS) foram depositadas L partículas e medidas a altura média e a rugosidade do filme, sendo esta definida em termos do desvio padrão das alturas, em relação à altura média.

Outro modelo utilizado por Horowitz é o RDSR, no qual as regras são semelhantes às regras utilizadas pelo RD, sendo permitida a difusão das partículas para um sítio primeiro vizinho, após ser adsorvida num sítio qualquer da superfície. Neste modelo, denominado RDSR/RD, são utilizadas as regras dos modelos RDSR e RD e, antes da deposição de cada partícula, é escolhida quais destas regras serão utilizadas. Com probabilidade p escolhe-se para a deposição o RDSR e com probabilidade $1-p$, o RD. Deste modo ocorre uma espécie de “competição” entre os dois modelos, com ou sem difusão. Horowitz, Claudio Et al. [3] utilizaram redes unidimensionais de diferentes tamanhos e diferentes valores de p . Modelos teóricos e dados computacionais sugerem que a rugosidade do filme segue leis de potência: $w \propto t^\beta$ e $w \propto L^\alpha$.

Como variação do modelo de Horowitz, propomos primeiramente depositar uma partícula sobre o substrato e posteriormente permitir que a partícula se difunda, conforme uma taxa de probabilidade definida. A Figura 1 (a) ilustra os resultados obtidos para a rugosidade em função do tempo (em MCS), para $L=256$ e diferentes valores de p . Na Figura 1(b) fixamos $p=0.16$ e modificamos os tamanhos da rede.

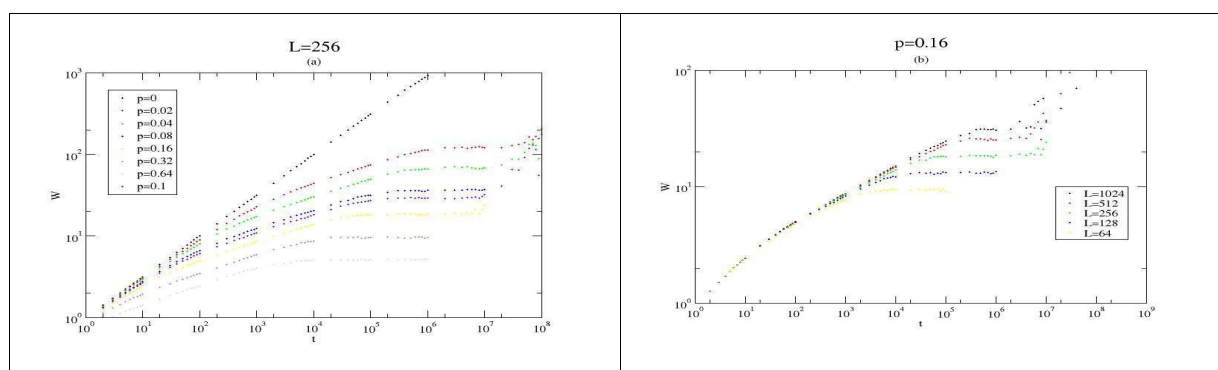


FIG. 1 (a) Rugosidade em função do tempo com $L=256$. (b) Rugosidade em função do tempo com $p=0.16$

Era esperado um gráfico diferente para a rugosidade, explicitando uma mudança na rugosidade em função do tempo com a mudança efetuada. No entanto, os resultados da Figura 1 (a) e da Figura 1 (b) são muito parecidos com aqueles encontrados no trabalho de Horowitz, Claudio Et al. [3], evidenciando que não há diferença física entre decidir se a partícula deverá difundir antes de ser depositada ou após sua deposição.

REFERÊNCIAS

- [1] Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model – Fereydoon Family e Tamás Vicsek – J. Phys. A: Math. Gen. 18 (1985) L75-L81;
- [2] Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion – Fereydoon Family – J. Phys. A: Math. Gen. 19 (1986) L441-L446;
- [3] Competitive growth model involving random deposition and random deposition with surface relaxation – Claudio M. Horowitz, Roberto A. Monetti e Ezequiel V. Albano – Physical Review E, Volume 63, 066132;