

Modelado de un proceso de agregación en presencia de un campo

Model for an aggregation process in presence of a field

A.L. Pastore y Piontti¹, C. E. La Rocca¹ y L. A. Braunstein¹

¹*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad Nacional de Mar del Plata
Funes 3350, 7600 Mar del Plata, Argentina
e-mail: apastore@mdp.edu.ar*

Modelamos un proceso que captura las propiedades de los experimentos de electrodeposición en una celda rectangular. Estudiamos el volumen de los agregados en la base de un proceso de arbolado^(1,2). En nuestro modelo, que se desarrolla en $l + 1$ dimensiones, las partículas son arrojadas desde un punto por arriba de la interface y éstas pueden difundir. La difusión hacia arriba está prohibida mientras que en las direcciones laterales difunden con probabilidad $1-p$ y con probabilidad p hacia abajo. Aquí p es un parámetro de ajuste que tiene en cuenta la intensidad del campo eléctrico. Cuando una partícula queda a primer vecino de otra que pertenece a un solo árbol, se pega a él. Si la partícula tiene más de un primer vecino que pertenecen a diferentes árboles, uno de ellos es seleccionado al azar y la partícula se pega al árbol seleccionado. Calculamos la rms de las alturas h_s , la rms de los anchos w_s y la distribución de tamaño de los árboles, N_s en función de su masa s para distintos valores de p . Encontramos que el comportamiento de escala de h_s y N_s con s cambia con p mientras que w_s no depende de p . En el límite $p \rightarrow 1$, los valores obtenidos para los exponentes que caracterizan el comportamiento de escala de las magnitudes estudiadas aquí coinciden, dentro de las barras de error, con las encontradas en el experimento de electrodeposición de plata⁽³⁾, el cual se ha sugerido que pertenece a la clase de universalidad de la ecuación de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ). Para $p < 1$, los resultados sugieren que nuestro modelo pertenece a otra clase de universalidad.

Palabras Claves: crecimiento de interfaces, agregados, relaciones de escala

We simulate a model that captures all the features of the silver electrodeposition experiment in a rectangular cell. We study the bulk of the aggregates on the basis of a treeing process^(1,2). The model proposed is a diffusion limited process in $l + 1$ dimension where the particles are dropped from the top of a rectangular lattice and are allowed to diffuse. The diffusion upwards is forbidden, whereas in the other directions the particles are allowed to diffuse with probability $1-p$ to the lateral nearest neighbors positions and with probability p downwards. Here p takes into account the strength of the electric field. When a newly deposit particle has a nearest neighbor which belongs to only one tree, it sticks to that tree. If the particle has more than one nearest neighbor that belongs to different trees one of them is selected at random and the particle sticks to the chosen tree. We compute the rms heights h_s and rms widths w_s and tree's distribution N_s as function of the mass s of the trees for different values of p . We found that the scaling behavior of h_s and N_s depends on p , while w_s doesn't depend on p . In the limit $p \rightarrow 1$, the values obtained for the exponents, that characterize the scaling behaviour of the magnitudes studies here, coincide between the error bars, with the one found in the experiment of silver electrodeposition⁽³⁾. It was suggested that this experiment belong to the Kardar-Parisi-Zhang (KPZ). For $p < 1$, the results suggest that our model belongs to another universality class.

Key Word: interface growths, aggregates, scaling relationship

I. INTRODUCCIÓN

El estudio del crecimiento de interfaces o superficies ha atraído recientemente mucha atención debido a sus potenciales aplicaciones tecnológicas. Estas interfaces pueden ser encontradas en numerosos procesos físicos, químicos y biológicos como por ejemplo crecimiento de películas, ya sea por deposición de vapor o electrodeposición química⁽³⁾, crecimiento de colonias de bacterias⁽⁴⁾ y propagación de fuegos forestales⁽⁴⁾. Las interfaces de estos sistemas exhiben propiedades autoafines en un gran rango de escalas espaciales y temporales. Por lo tanto casi todos los estudios se han enfocado en las propiedades de escala de la interface, las cuales están principalmente caracterizadas por su rugosidad W , definida como la raíz cuadrática media (rms) a un tiempo dado t de las fluctuaciones de la altura media, y está dada por

$$W(L,t) = \left(\langle h^2(t) \rangle - \langle h \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

en donde L es la dimensión lineal del sistema, $h(t)$ es la altura de la interface al tiempo t , $\langle \dots \rangle$ denota promedio sobre configuraciones y sobre la superficie d -dimensional de tamaño típico L . La rugosidad W de una interface está caracterizada por la relación de Family-Vicsek⁽⁵⁾ la cual describe su comportamiento de escala con respecto a t y L

$$W(L,t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (1)$$

en donde la función de escala $f(u) \sim u^\beta$ para $u \ll 1$ y $f(u) \sim \text{constante}$ para $u \gg 1$, con $\beta = \frac{z}{\alpha}$ conocido como el exponente de crecimiento, z y α son los exponentes dinámicos y de rugosidad respectivamente. Las propiedades de las interfaces han sido extensivamente estudiadas, por el contrario hay pocos estudios sobre las propiedades del volumen del

crecimiento^(2,3). La medición de las propiedades del volumen del proceso de crecimiento es una técnica experimental y numérica, muy útil para la clasificación de algunos agregados en clases de universalidad.

Evidencias experimentales de un agregado electroquímico sobre un sustrato 1+1 dimensional (la segunda dimensión es la altura del agregado)^(3,7), muestran que, una aproximación alternativa para la caracterización del sistema en una clase de universalidad puede ser llevada a cabo analizando los patrones de las ramas de las estructuras congeladas, que aparecen debido a procesos competitivos entre estructuras vecinas del crecimiento.

Estas estructuras de ramas o “árboles” pueden ser caracterizadas por las rms de sus alturas y rms de sus anchos, las cuales exhiben invarianza de escala. Por lo tanto estas magnitudes están caracterizadas por exponentes que, dentro de las barras de error, se aproximan a aquellos predichos por la ecuación de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ). Existe además evidencia numérica, presentada por Romá *et. al*, sobre el modelo de deposición balística (BD) que demuestra que el volumen de los agregados formados pueden ser separados en un conjunto de estructuras invariantes de escala llamadas 'árboles'. Estos árboles presentan, en su estructura, invarianza de escala espacial y temporal, y los exponentes que describen esta invarianza se parecen a los de la clase de universalidad KPZ. En estos estudios la intensidad del campo eléctrico y la difusión no juegan ningún rol. Los resultados sugieren que tanto el experimento como el modelo caen dentro de la clase de universalidad KPZ.

En este trabajo, presentamos un modelo para un proceso de agregado en 1+1 dimensión en donde se tiene en cuenta la difusión y la intensidad del campo eléctrico. Usando el hecho de que estos procesos pueden ser pensados como la superposición de árboles individuales (proceso de arbolado), analizamos las propiedades del volumen de los patrones en crecimiento de los árboles que dejan de crecer (árboles muertos) sobre la base del proceso de arbolado. Encontramos que, a diferencia de los estudio anteriores, el sistema hace una transición de una clase de universalidad KPZ, en el límite de difusión despreciable a otra cuando la difusión juega un rol importante.

II. Arbolado y autoafinidad

Sea un agregado que crece sobre un sustrato d -dimensional. El agregado está compuesto por árboles que compiten entre sí para crecer y dan lugar al patrón total. Las propiedades estructurales de los árboles individuales y del agregado entero están determinados por el mecanismo de crecimiento. Se sabe que⁽¹⁾:

$$\begin{aligned} h_s &\sim s^{\nu_{\parallel}} \\ w_s &\sim s^{\nu_{\perp}} \end{aligned} \quad (2)$$

en donde h_s y w_s son los rms de las alturas y los anchos de los árboles de masa s , ν_{\parallel} y ν_{\perp} son los exponentes de las longitudes de correlación paralela y perpendicular a la dirección de crecimiento respectivamente. Cuando

$\nu_{\parallel} = \nu_{\perp}$
se trata de crecimientos autosimilares en cambio cuando son distintos los crecimientos son autoafines. Definiendo N_s como el número de árboles con s partículas, el número de partículas por unidad de volumen está dado por

$$N = \sum_s s N_s / L^d = \sum_s s n_s, \quad (3)$$

en donde

$$n_s \sim s^{-\tau} f(s^{\sigma}/N). \quad (4)$$

Substituyendo la ec.(4) en la ec.(3) y tomando el término principal, se obtiene

$$\sigma = 2 - \tau,$$

con $\sigma = \nu_{\parallel}(D-d)$ ⁽¹⁾ para agregados autoafines con dimensión geométrica D y

$$\tau = 2 - \nu_{\parallel}(D-d). \quad (5)$$

Esta ecuación relaciona al exponente τ de la distribución de tamaños de los árboles con el exponente ν_{\parallel} , la dimensión geométrica D y d . Para las condiciones experimentales de la ref. (3), $D=2$ y $d=1$ luego

$$\tau = 2 - \nu_{\parallel}. \quad (6)$$

Por otro lado considerando que el volumen de un árbol V_s escala con s como $V_s \sim h_s w_s^d \sim s^{\nu_{\parallel} + d\nu_{\perp}}$, y definiendo $\pi = \nu_{\parallel} + d\nu_{\perp}$, cuando $\pi=1$ los árboles son compactos, y para $\pi > 1$ los árboles dejan de serlos.

Identificando la longitud de correlación paralela $\xi_{\parallel} \sim t^{1/z}$ con w_s y a h_s con $t^{(7)}$,

$$z = \frac{\nu_{\parallel}}{\nu_{\perp}}. \quad (7)$$

Luego el exponente dinámico z (ver eq.(1)), que es un exponente que caracteriza a la interface está relacionado con los exponentes que caracterizan comportamientos de magnitudes del volumen.

III. Modelo y Resultados de la Simulación

Nuestro modelo se desarrolla en una red cuadrada de 1+1 dimensiones, en donde una dimensión es la superficie de tamaño lineal L y la otra es la altura de la interface. La interface está representada por el conjunto $\{h_i\}$, $i=1, \dots, L$, en donde h_i es la altura de la interface en la columna i .

Usamos condiciones de contorno periódicas en la dimensión lateral. Al comienzo la interface es chata, o sea que sin pérdida de generalidad asumimos que $h_i=0$ como condición inicial. Las partículas son arrojadas en una columna seleccionada al azar desde una cierta altura (en general x veces la altura máxima de la interface) y estas pueden difundir con probabilidad p hacia abajo y $1-p$ en las direcciones laterales. La difusión hacia arriba esta prohibida. Aquí p representa la intensidad del campo eléctrico y $1-p$ tiene en cuenta el transporte de masa o “difusión” debido a la energía térmica transferida por la corriente del volumen a la

solución en donde se mueven las partículas. Las partículas depositadas en la interface chata son las semillas del proceso de arbolado. Si una partícula queda a primer vecino de un solo árbol pasa a ser parte de él. Si en cambio queda primer vecino de más de un árbol, se selecciona al azar el árbol al cual esta partícula se pegará. El proceso se detiene cuando exactamente N_L partículas se han depositado. Para calcular los exponentes que caracterizan la clase de universalidad del modelo, estudiamos las magnitudes que determinan las propiedades de escala del volumen del agregado tales como la rms de la altura h_s , la rms del ancho w_s y N_s en función de la masa s de los árboles (Ver Sec. II), con

$$h_s^2 = \frac{1}{S} \sum_{ies} h_i^2, \quad (8)$$

en donde h_i es la altura de la columna i , y

$$w_s^2 = \frac{1}{S} \sum_{ies} w_i^2 \quad (9)$$

en donde w_i es el ancho de la fila i . Para este proceso de arbolado h_s y w_s dependen de s como $h_s \sim s^{\nu_{\parallel}}$ y $w_s \sim s^{\nu_{\perp}}$ (ver Sec.II). Como nuestro modelo tiene un parámetro p de ajuste, se espera que los exponentes dependan de p . Nótese que, en nuestro caso, $p=1$ no es un proceso de deposición al azar, porque el proceso de selección del árbol, en donde una nueva partícula se depositará, genera correlaciones. Por lo tanto se espera que para $p \rightarrow 1$ (difusión cero) el proceso pertenezca a la misma clase de universalidad que el modelo de crecimiento BD o sea a la clase de universalidad KPZ. Por otro lado cuando la difusión es importante $p < 1$ se espera que $\nu_{\parallel}(p) > \nu_{\parallel}(p=1)$ porque cuando p disminuye, las partículas pueden difundir más en la dirección lateral, reduciendo el apantallamiento de los árboles. Para probar nuestra conjetura computamos h_s para distintos valores de p . Como la dirección principal del crecimiento es perpendicular a la superficie, analizamos solamente los casos en que $p \geq 0.32$.

En la Figura 1 mostramos el gráfico log-log de h_s en función de s para distintos valores de p . Se puede observar que a medida que p decrece la pendiente de h_s aumenta, por lo tanto $\nu_{\parallel} = \nu_{\parallel}(p)$. Obtenemos $\nu_{\parallel}(p)$ ajustando las curvas con una ley de potencia en el régimen de validez. Los valores obtenidos se muestran en la Tabla I.

En la Figura 2 graficamos h_s como función de $s^{\nu_{\parallel}(p)}$. Se puede ver como todas las curvas colapsan. Esto demuestra que los valores de $\nu_{\parallel}(p)$ obtenido por el ajuste son correctos. Se puede observar además que la ordenada al origen de las curvas son cero y que las pendientes son uno. Por lo tanto la relación entre h_s y s es $h_s = s^{\nu_{\parallel}(p)}$.

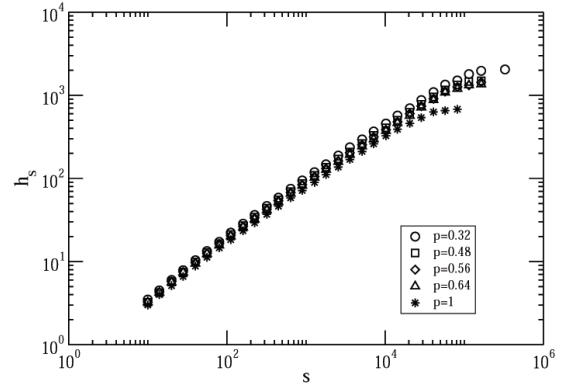


Figura 1: Gráfico log-log de h_s en función de s para distintos valores de p . En todas las simulaciones usamos $L=10^3$, $N_L=10^6$ y típicamente 10^5 realizaciones.

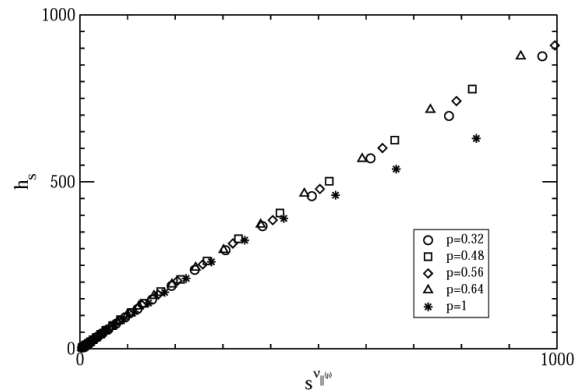


Figura 2: Gráfico de h_s en función de $s^{\nu_{\parallel}(p)}$ para distintos valores de p , con los valores de $\nu_{\parallel}(p)$ de la Tabla I. Se puede ver que las curvas colapsan en una con pendiente uno.

Para obtener el valor de $\tau(p)$ computamos la distribución de los tamaños de árboles $N_s(s)$. En la Figura 3a) graficamos en escala log-log N_s en función de s . Por un ajuste de ley de potencia se obtiene el exponente $\tau(p)$. Para demostrar que estos exponentes están calculados con exactitud, en la Figura 3b) mostramos el gráfico en escala log-log de $N_s/s^{\nu_{\parallel}(p)}$ en función de s . El hecho de que las curvas graficadas de esta manera sigan una línea recta en el régimen de la ley de potencia indican que $\tau(p)$ está medido con exactitud.

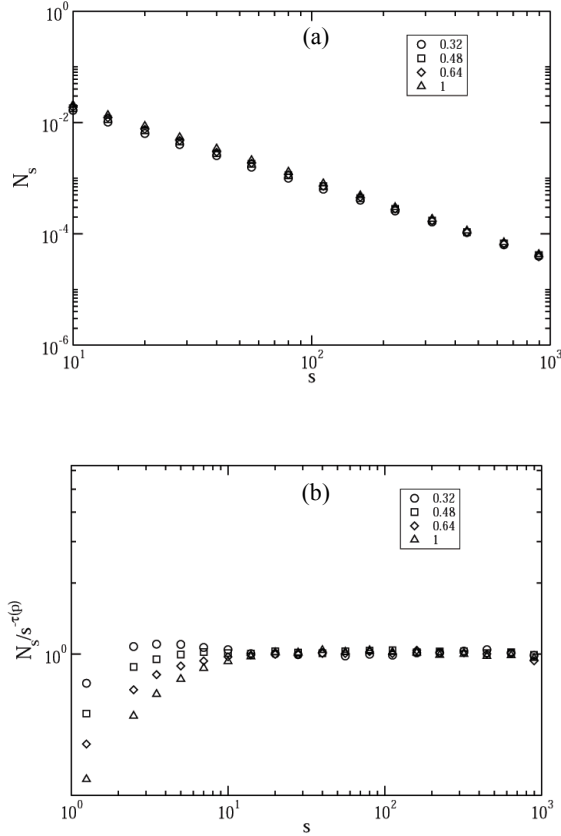


Figura 3: Gráfico log-log para distintos valores de p de (a) n_s en función de s (b) $N_s / s^{\pi(p)}$ en función de s .

Haciendo el mismo análisis para $w_s(s)$ para distintos valores de p encontramos que v_{\perp} no depende de p . El valor calculado es $v_{\perp} \approx 0.42 \pm 0.02$. Para confirmar este resultado, computamos la distribución condicionada de w dado s y p , $P(W|s,p)$.

Observamos que esta distribución se puede aproximar bastante bien con una forma funcional Gaussiana, independientemente del valor de p , luego

$$P(w/s) \sim e^{-\frac{(w-\langle w \rangle)^2}{2\sigma^2}}$$

con $\langle w \rangle = w^* \sim s^{v_{\perp}}$, en donde w^* es el valor más probable, que en una Gaussiana coincide con el valor medio.

Calculamos w^* del máximo de $P(W|s,p)$. En la Figura 4 graficamos $P(w/s)s^{v_{\perp}}$ en función de $w/s^{v_{\perp}}$, se observa como ante esta transformación todas las curvas colapsan para todos los valores de p . Esto indica claramente que v_{\perp} no depende de p .

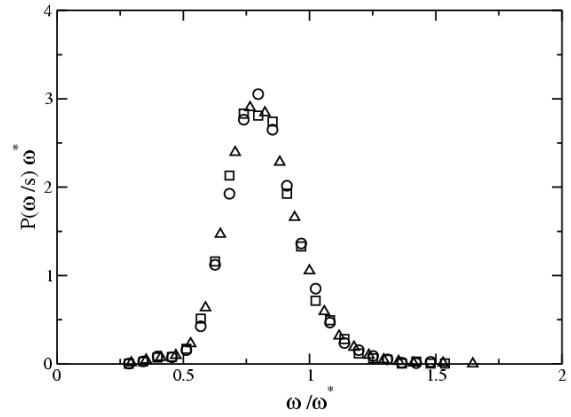


Figura 4: Gráfico de $P(w/s)s^{v_{\perp}}$ en función de $w/s^{v_{\perp}}$ para distintos valores de p . Los \circ , \square y \triangle son para $p=0.56$, $p=0.64$, $p=1$ respectivamente. Por claridad mostramos el gráfico para un solo valor de s . Las curvas colapsan para todos los valores de s e independientemente del valor de p .

Usando los valores de $v_{\parallel}(p)$ y v_{\perp} estimamos el exponente dinámico z usando la Ec.(7). Los valores se muestran en la Tabla I. Se observa que a medida que p disminuye z aumenta. Para $p=1$, el valor de z obtenido coincide dentro de las barras de error con el valor de la clase de universalidad KPZ. A medida que p disminuye z aumenta, lo que podría indicar que el sistema podría pertenecer a otra clase de universalidad, tal como la de Edward Wilkinson (EW). Los exponentes de EW se muestran en la Tabla I.

Tabla I

p	$v_{\parallel}(p)$	$\pi(p)$	$\tau(p)$	z
0.32	0.667(2)	1.09(2)	1.32(2)	1.59(8)
0.48	0.652(2)	1.07(2)	1.35(2)	1.55(8)
0.56	0.645(2)	1.07(2)	1.35(2)	1.54(8)
0.64	0.640(2)	1.06(2)	1.36(2)	1.52(8)
1	0.627(2)	1.05(2)	1.38(2)	1.49(8)
EXP	0.63(3)	1.09(7)	1.37(4)	-
BD	0.6	-	1.4	-
KPZ	0.6	1	1.4	1.5
EW	0.65	1	1.35	2

Lista de los exponentes $v_{\parallel}(p)$, $\pi(p)$, $\tau(p)$ y z medidos en nuestro modelo para distintos valores de p . El paréntesis indica la incerteza en la última cifra.

La clasificación de nuestro modelo en su clase de universalidad cuando $p < 1$ es un tema abierto que seguimos estudiando. Es necesario simular sistemas

más grandes para estudiar las correcciones de tamaño finito. Este estudio es muy costoso en memoria y tiempo de cómputo y será el objetivo de una futura publicación.

III. Conclusiones

En este trabajo presentamos un modelo en donde se tiene en cuenta la intensidad del campo eléctrico y la difusión a través de un parámetro p . Nuestro modelo representa bien al experimento de agregado electroquímico en el límite $p \rightarrow 1$. En este límite se encuentran, dentro de las barras de errores, los mismos exponentes que los del modelo BD. Encontramos que V_{\parallel} aumenta cuando p disminuye, mientras que V_{\perp} no depende de p . Si bien en el límite $p \rightarrow 1$ nuestro modelo podría pertenecer a otra clase de universalidad hace falta estudiar mas a fondo las correcciones de tamaño finito para $p < 1$ con el fin de clasificar nuestro modelo en este régimen en una clase de universalidad.

L. A. B. y A. L. P. y P. agradecen a la UNMDP por el financiamiento.

Referencias

- 1-M. Matsushita, P. Meakin, "Cluster size distribution of self-affine fractals" Phys. Rev. A **37**, 3645 (1988).
- 2-F. Romá, C. M. Horowitz and E. V. Albano, "Numerical study of the development of bulk scale-free structures upon growth of self-affine aggregates" Phys. Rev. E **66**, 066115 (2002).
- 3-C. M. Horowitz, M. A. Pasquale, E. V. Albano and A. J. Arvia, "Experimental evidence of the development of scale invariance in the internal structure of self-affine aggregates" Phys. Rev. B **70**, 033406 (2004); E. V. Albano, R. C. Salvarezza, L. Vázquez and A. J. Arvia, "Validity of the Kardar-Parisi- Zhang equation in the asymptotic limit of metal electrodeposition" Phys. Rev. B **59**, 7354 (1999).
- 4-A.-L. Barabási and H. E. Stanley, "Fractal Concepts in Surface Growth", Cambridge Univ. Press, New York (1995); P. Meakin, "Fractals, scaling and growth far from equilibrium", Cambridge Univ. Press, Cambridge (1998).
- 5- F. Family and T. Vicsek, "Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model" J Phys. A **18**, L75 (1985)
- 6- J. Krug and P. Meakin, "Microstructure and surface in ballistic deposition at oblique incidence" Phys. Rev. A, **40**, 2064, (1989).