VILNIAUS UNIVERSITETAS
FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ CENTRAS

VAIDAS JUKNEVIČIUS

Erdvinis ir laikinis elgesys paviršių augimo kontinuumo modeliuose

Daktaro disertacijos santrauka
Fiziniai mokslai, fizika (02 P)

Vilnius, 2017

Disertacija rengta 2012–2016 m. Vilniaus universitete, Teorinės fizikos ir astronomijos institute.

Mokslinis vadovas:
habil. dr. Bronislovas Kaulakys (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P)

Disertacija bus ginama viešame disertacijos gynimo tarybos posėdyje.

Tarybos pirmininkas:
prof. habil. dr. Gediminas Juzeliūnas (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P)

Nariai:
dr. Artūras Acus (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P),
habil. dr. Evaldas Tornau (Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras, fiziniai mokslai, fizika – 02 P),
prof. habil. dr. Egidijus Anisimovas (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P),
prof. habil. dr. Kęstutis Staliūnas (Katalonijos politechnikos universitetas (Ispanija), fiziniai mokslai, fizika – 02 P)

Disertacija bus ginama viešame Vilniaus universiteto Fizikos mokslo krypties tarybos posėdyje 2017 m. **lapkričio 29** d. **14** val. NFTMC D401 auditorijoje.

Disertacijos santrauka bus išsiuntinėta 2017 m. spalio 29 d.

Disertaciją galima peržiūrėti Vilniaus universiteto bibliotekoje, Fizinių ir technologijos mokslų centro bibliotekoje ir VU interneto svetainėje adresu:

http://www.vu.lt/lt/naujienos/ivykiu-kalendorius

VILNIUS UNIVERSITY
CENTER FOR PHYSICAL SCIENCES AND TECHNOLOGY

VAIDAS JUKNEVIČIUS

Spatio-temporal behavior in continuum surface growth models

Summary of Doctoral Dissertation
Physical Sciences, Physics (02P)

Vilnius, 2017

The research was performed in 2012–2016 at Vilnius university, Institute of Theoretical Physics and Astronomy.

Scientific supervisor:

Habil. Dr. Bronislovas Kaulakys (Vilnius University, Physical Sciences, Physics – 02 P)

Dissertation will be defended at Vilnius University Dissertation Defense Board.

Chairman:

prof. habil. dr. Gediminas Juzeliūnas (Vilnius University, Physical sciences, Physics – 02 P)

Members:

dr. Artūras Acus (Vilnius University, Physical sciences, Physics – 02 P),
habil. dr. Evaldas Tornau (NFTMC, Physical sciences, Physics – 02 P) ,
prof. habil. dr. Egidijus Anisimovas (Vilnius University, Physical sciences, Physics – 02 P),
prof. habil. dr. Kęstutis Staliūnas (Universitat Politecnica de Catalunya, Barcelona, Spain, Physical sciences, physics – 02 P)

Doctoral Dissertation will be defended at the **National Center for Physical Sciences and Technology (NFTMC)**, Saulėtekio al. 3, Vilnius, **room D401** on **November 29, 2 PM**.

Summary of Doctoral Dissertation was sent out on October 29, 2017.

Dissertation is available at libraries of Vilnius University and Center for Physical Sciences and Technology, as well as on Vilnius University website:

http://www.vu.lt/lt/naujienos/ivykiu-kalendorius

Turinys

1 Įžanga

Natūraliai susidarę ir laboratorinių eksperimentų ar technologinių procesų metu sukuriami paviršiai yra svarbūs tiek dėl savo praktinių taikymų, tiek ir teoriniu požiūriu.

Paviršių geometrinė struktūra didele dalimi nulemia jų savybes, todėl svarbu išmanyti procesus, kurie sąlygoja tos struktūros susidarymą, ir turėti kiekybinę teoriją tai struktūrai aprašyti. Dauguma nagrinėjamų paviršių yra netvarkūs, t. y., jų struktūroms nebūdinga tolimoji tvarka. Tokiems paviršiams charakterizuoti pasitelkiami statistiniai parametrai, tokie kaip paviršiaus šiurkštumas, gruoblėtumas ir kiti iš paviršiaus aukščio skirstinių ir koreliacijos funkcijų išvedami dydžiai. Kadangi nemažai daliai nagrinėjamų netvarkių paviršių yra būdingos skirtingose skalėse atsikartojančios panašios struktūros, svarbios yra ne tik minėtų dydžių globaliosios vertės, bet ir jų kitimo pobūdis keičiant stebėjimo mastelį, t. y., savybės skalės kitimo atžvilgiu (angl., scaling). Remiantis šiomis savybėmis, galima didelę dalį labai skirtingų paviršių formavimosi procesų suskirstyti į vos kelias universalumo klases, nusakančias bendras jų savybes.

Esminį vaidmenį paviršių tyrimuose atlieka modeliavimas, nes supaprastinti modeliai, gebantys sugeneruoti eksperimentuose stebimiems ekvivalenčius paviršius, leidžia geriau suprasti realiai veikiančius formavimosi procesus. Naudojami modeliai būna įvairių tipų: nuo diskrečių ląstelinių automatų tipo simuliacijų iki įvairaus detalumo mikroskopinių modelių (iki pat molekulinės dinamikos su realistiškomis tarpatominėmis sąveikomis). Svarbią vietą modeliavime užima ir vadinamieji kontinuumo modeliai, kurie aprašo paviršiaus formą ir jo evoliuciją masteliuose, gerokai viršijančiuose pavienių atomų dydį, bei gerokai už dalelių relaksacijos laikus didesnėse laiko skalėse. Šie modeliai išreiškiami deterministinėmis ar stochastinėmis dalinių išvestinių lygtimis.

Disertacijoje nagrinėjamas vienas iš paviršių formavimosi kontinuumo modelių, išreikštas apibendrintąja Kuramoto-Sivashinsky (gKS) lygtimi, aprašančia paviršiaus aukščio profilio laikinę evoliuciją. Šis modelis gana tiksliai atkartoja plonų amorfinių sluoksnių augimo eksperimentinius rezultatus. Bedimensinėje formoje gKS lygtis teturi vieną nepriklausomą parametrą, lemiantį besiformuojančio paviršiaus savybes.

Net ir paprastesnė bei žymiai daugiau tyrinėta paprastoji Kuramoto-Sivashinsky (KS) lygtis, kuri yra atskiras šiame darbe nagrinėjamos gKS lygties atvejis, buvo sukėlusi nemažai diskusijų dvimačiu atveju, ir kol kas nėra iki galo išsiaiškinta, kuriai universalumo klasei ją galima priskirti. Viena iš to priežasčių yra tai, kad KS bei gKS modeliai, skirtingai nuo daugumos kitų paviršių augimo modelių, suskirstomų į gerai žinomas universalumo klases, turi tiesinį nestabilumą, stiprinantį konkretaus bangos skaičiaus modas ir tokiu būdu formuojantį charakteringą dydį turinčias paviršiaus struktūras (kalniukus). Šios struktūros savo charakteringų dydžių ruože „užgožia“ skalės invariantiškumu pasižyminčias aukščio variacijas, todėl universalių modelio savybių galima ieškoti tik gerokai didesnėse skalėse.

Šiame darbe pristatomi rezultatai praplečia diskusiją bendresniam atvejui ir parodo, kad baigtinio dydžio sistemose gautų paviršių savybės skalės kitimo atžvilgiu stipriai priklauso nuo lygties parametro vertės, o pernormavimo grupės (angl. renormalization group) teorijoje numatomas asimptotinis elgesys, neturintis priklausyti nuo šio parametro, gKS atveju gali būti nepasiekiamas net ir labai didelėms sistemoms.

Esant pakankamai mažoms neneigiamoms gKS lygties parametro vertėms, po pradinio pereinamojo (šiurkštėjimo ir grubėjimo) proceso, kinetika įsisotina ir tampa stacionari: paviršių charakteringi parametrai – pavyzdžiui, paviršiaus šiurkštumas ir grubumas – [chaotiškai] svyruoja apie savo vidutines vertes. Disertacijoje nagrinėjamos šiame režime pasireiškiančios paviršių morfologinės ir dinaminės savybės didelėse ir mažose skalėse. Didinant gKS lygties parametrą, gaunama grubesnė smulkioji įsisotinusio paviršiaus struktūra, o jos stacionarioji dinamika lėtesnė. Didelėms parametrų vertėms dinamika tampa nestacionari. Yra parodoma, kad ribiniu atveju, kai parametro vertė artėja prie begalybės, iš gKS lygties gaunama kita, konservatyvioji Kuramoto-Sivashinsky lygtis, kurios dinamika pasižymi globaliu nestacionariu struktūros grubėjimu. Šioje disertacijoje pateikiamas ir iki šiol paviršių augimo modeliuose nestebėtas reiškinys – iš pažiūros, stacionarios dinamikos staigus virsmas į nestacionarią po ilgo realizacijos laiko, susijęs su lokaliai pasireiškiančiu struktūros grubėjimu.

Šioje santraukoje trumpai apžvelgiamas disertacijos „Erdvinis ir laikinis elgesys paviršių augimo kontinuumo modeliuose“ (angl. „Spatio-temporal behavior in continuum surface growth models“) turinys ir pateikiami pagrindiniai rezultatai.

2 Įvadas

Disertacijos tyrimų objektas yra plonų amorfinių paviršių augimą aprašančio modelio, išreikšto apibendrintąja Kuramoto-Sivashinsky (gKS) lygtimi, savybės. Bedimensėje formoje vienintelį nepriklausomą parametrą α turinti netiesinė dalinių išvestinių gKS lygtis,

$$\partial_t h = -\nabla^2 h - \nabla^4 h - \alpha \nabla^2 (\nabla h)^2 + (\nabla h)^2 , \tag{1}$$

nagrinėta dviejose disertacijos autoriaus mokslinėse publikacijose [1,2], pasižymi chaotiškai besivystančiomis netvarkiomis erdvinėmis struktūromis.

Tokio tipo lygtys (su adityviu stochastiniu triukšmo nariu ir be jo) buvo sėkmingai panaudotos kaip kietųjų amorfinių paviršių augimo nusodinimo iš garų fazės budu [3–5] ir molekulinės epitaksijos bei jonų srautu indukuoto barstymo (ion beam sputtering) procesų metu susidarančių nanostruktūrų formavimosi modeliai [6–10].

Dvimačiu atveju lygtis (1) aprašo (2+1)-dimensinio paviršiaus evoliuciją, t. y., paviršiaus, kurio aukštis $h(\boldsymbol{r}, t)$ laiku t yra apibrėžtas kaip funkcija ant dvimatės plokštumos $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^2$ (pagrindo), ir kuris auga statmena šiai plokštumai kryptimi.

Vienmatė (1) lygties versija yra išnagrinėta kiek išsamiau [11], o gauti rezultatai rodo gerą sutapimą su eksperimentuose gautais paviršių profiliais [12].

Lygtis (1) atskiru atveju, kai $\alpha = 0$, tampa gerai žinoma Kuramoto-Sivashinsky (KS) lygtimi [13–16]:

$$\partial_t h = -\nabla^2 h - \nabla^4 h + (\nabla h)^2 . \tag{2}$$

Pastaroji lygtis laikoma paradigminiu chaotinės paskirstytųjų parametrų sistemos modeliu ir buvo naudojama nagrinėjant ryšį tarp chaotinės dinamikos smulkiose skalėse ir stochastinio, Brauno judėjimą primenančio, elgesio didelėse skalėse [17–19].

Egzistuoja nemažai KS lygties (2) modifikacijų – su lokaliais ir nelokaliais slopinimo nariais, anizotropija, stochastiniu triukšmo nariu. Tokios lygtys naudotos modeliuoti, įvairius paviršių ėsdinimo ir erozijos jonų srautu procesus [20–25].

Pati lygtis (2) vienmačiu ir ypač dvimačiu atvejais yra aktyvių tyrimų ir dešimtmečius besitęsiančių ginčų objektu.

Yakhot pasiūlyta [26] ir vėliau kitų autorių patvirtinta [17, 18, 27] hipotezė, kad deterministinės vienmatės KS lygties (2) elgesys didelėse skalėse atitinka stochastinės lygties

$$\partial_t h = \nabla^2 h + (\nabla h)^2 + \eta \tag{3}$$

elgesį, kur η yra laike ir erdvėje nekoreliuoto Gauso triukšmo stochastinis narys.

Lygtis (3), žinoma kaip Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) lygtis [28], iš pradžių buvo pasiūlyta kaip kontinuumo modelis atitinkantis diskretų paviršių augimo balistinės depozicijos (BD) modelį [29], nes KPZ lygtis pasižymėjo analogiškomis skeilingo savybėmis (angl., scaling properties), t. y., savybėmis mastelio keitimo atžvilgiu, [30]. [1]

Vis dėlto, nepaisant gero KS ir KPZ lygčių skeilingo savybių atitikimo vienmačiu atveju, tie patys autoriai nesutarė dėl analogiškos atitikties dvimačiu atveju [18, 27, 36, 37], nes klausimui išspręsti trūko analitinių ir skaitmeninių rezultatų. Naujesni rezultatai remia poziciją, kad KS ir KPZ lygtys priklauso tai pačiai universalumo klasei [19, 38], tačiau ir šios išvados nėra galutinės, nes deterministinė KS lygtis pasižymi labai ilgais pereinamaisiais efektais.

Šios disertacijos autoriaus naudotų gerokai ilgesnių skaitmeninių simuliacijų rezultatai [1,2] KS lygties atveju rodo tas pačias skeilingo savybes, kokias pateikė Manneville ir Chaté [39], kurie gautus rezultatus priskyrė tiesinės stochastinės Edwards-Wilkinson (EW) [40] lygties elgesio tipui. Kadangi EW tipo elgesys gaunamas ir ikiasimptotiniame (sistemos dydžio atžvilgiu) KPZ lygties režime (perėjimo į asimptotinį elgesį galima tikėtis tik gerokai didesnėms sistemoms [41] nei naudotos minėtuose darbuose), galima teigti, kad [1] gauti rezultatai remia poziciją, jog KS ir KPZ lygčių elgesys dvimačiu atveju sutampa.

Bendresnio atvejo – gKS lygties (1), kai $\alpha > 0$ – skeilingo savybes iki šiol nagrinėjo tik šios disertacijos autorius [1, 2]. Šiuo atveju gauti rezultatai, pristatomi disertacijoje, nagrinėjamų sistemos dydžių intervale skiriasi nuo EW ir KPZ lygtyse stebimo elgesio.

[1]Modeliuojant sudėtingas sistemas, iš esmės labai skirtingų diskrečių ir kontinuumo modelių savybių sutapimas didelėse skalėse pasitaiko gana dažnai. Vienas iš labiausiai nusisekusių tokios atitikties pavyzdžių – gardelinių dujų modeliai. Šie ląstelinių automatų tipo diskretieji modeliai geba atkurti Navje-Stokso hidrodinamikos lygčių elgesį [31–34]. Darbą gardelinių automatų tematika yra publikavęs ir šios disertacijos autorius [35].

2.1 Disertacijos tikslas

Šioje disertacijoje siekiama pristatyti labai plačios ir praktikoje svarbios tyrimų srities – netvarkių paviršių augimo – teorinį aprašymą ir modeliavimą, pasitelkiant kontinuumo modelius, išreikštus netiesinėmis dalinių išvestinių lygtimis. Darbe nagrinėjamas plonų amorfinių sluoksnių augimo kontinuumo modelis, išreikštas dvimate apibendrintąja Kuramoto-Sivashinsky lygtimi (gKS), gebantis atkurti eksperimentuose stebimas paviršių struktūras ir jas charakterizuojančių globalių parametrų kinetiką. Gerai žinoma ir intensyviai tyrinėta Kuramoto-Sivashinsky (KS) lygtis – atskiras disertacijoje nagrinėjamos lygties atvejis – yra plačiai taikoma kaip paradigminis sudėtingų, chaotiškai laike ir erdvėje besielgiančių sistemų modelis. Net ir šis gerokai paprastesnis modelis yra sukėlęs nemažai ginčų dėl savo savybių skalės kitimo atžvilgiu (angl., scaling properties) dvimačiu atveju, todėl analogiškų savybių tyrimas mažiau tyrinėtame, tačiau savo sąsajomis su eksperimentais svarbiame, modelyje atrodo įdomus ir savalaikis. Pagrindinis disertacijos tikslas yra pademonstruoti autoriaus publikacijose pristatytus erdvinio paviršiaus šiurkštumo skeilingo (angl., scaling) sąryšius [1] ir dinamines laiko bei erdvės skalių sąsajas [2] gKS modelyje.

2.2 Ginamieji teiginiai

Disertacijos autoriaus atlikti tyrimai leidžia suformuluoti keletą teiginių, kuriuos remia disertacijoje pateikiami rezultatai. Disertacijoje ginami šie teiginiai:

1. Plonų sluoksnių augimo kontinuumo modelis, išreikštas apibendrintąja Kuramoto-Sivashinsky (gKS) lygtimi, mažose skalėse generuoja netvarkius ląstelių formos raštus, pasižyminčius charakteringu dydžiu ir, tuo pat metu, kuria lėtas saviafininio (angl., self-affine) pabūdžio aukščio variacijas, neturinčias charakteringo ilgio.

2. Bedimensėje formoje gKS lygtis turi vienintelį nepriklausomą parametrą, lemiantį susidarančių paviršiaus struktūrų erdvinę struktūrą ir dinamines savybes. Iš paviršių augimo modelio išplaukia, kad minėtasis parametras turi būti neneigiamas, o šio verčių ruožo galuose gaunami skirtingi ribiniai atvejai:

   (a) Paprastoji Kuramoto-Sivashinsky (KS) lygtis, pasižyminti erdvėje ir laike chaotiška stacionaria dinamika, gaunama, kai parametro vertė lygi nuliui, ir

   (b) Konservatyvioji Kuramoto-Sivashinsky (cKS) lygtis, sukurianti nestacionariai grubėjančias kalniukų pavidalo stuktūras, gaunama riboje, kai parametro vertė artėja į begalybę, pritaikius kitokią skalių transformaciją.

Dinamika esant baigtinėms teigiamoms parametro vertėms įsiterpia tarp šių dviejų ribinių atvejų, kaip paaiškinta tolesniuose teiginiuose.

3. KS lygtis — atskiras gKS atvejis — rodo tas pačias stacionarią dinamiką pasiekusių (įsisotinusių – angl., saturated) paviršių savybes skalės kitimo atžvilgiu, kurios stebimos KPZ lygties ikiasimptotiniame (angl., pre-asymptotic) režime. Šie rezultatai remia teigiamą atsakymą į prieštaringų išvadų sulaukusį ir iki galo neatsakytą klausimą, ar KS lygtis priklauso KPZ lygties universalumo klasei.

4. gKS lygties dinamika po įsisotinimo, esant mažoms teigiamoms parametrų vertėms, kaip ir KS lygties atveju yra stacionari, tačiau gaunamų lėtų paviršių aukščio variacijų savybės skalės kitimo atžvilgiu skiriasi nuo KS (ir nuo KPZ) lygties savybių. Nagrinėjamų sistemos dydžių intervale minėtosios savybės stipriai priklauso nuo lygties parametro.

5. Mažais atstumais gaunami netvarkūs ląstelinės formos raštai (angl., cellular patterns) taip pat priklauso nuo lygties parametro: didesnėms parametro vertėms gaunamos grubesnės (stambesnės) įsisotinimo režimą pasiekusių paviršių kalniukų pavidalo struktūros. Nepaisant to, naudojant paprastą geometrinį samprotavimą, parodoma, kad vidutinė kalniukų forma išlieka statistiškai panaši įvairioms parametrų vertėms.

6. Analizuojant paviršių struktūrą aprašančių globalių dydžių (pvz., paviršiaus šiurkštumo) kinetiką, esant įvairiems sistemos dydžiams, gaunami sąryšiai tarp saviafininio pobūdžio lėtų aukščio variacijų laiko ir erdvės skalių. Gautieji sąryšiai yra laipsninio pabūdžio, o laipsnio rodikliai juose, susiję su sistemos dinaminiais rodikliais (angl., dynamical exponents), mažėja didinant gKS lygties parametrą.

7. Toliau didinant parametrų vertes, pasiekiamas nestacionarus režimas, kuriame įsisotinimas nevyksta. Staigūs kinetikos pakitimai, kuomet paviršiaus šiurkšumas ima staigiai augti, šiame parametrų ruože yra susijęs su lokalių struktūrų, iškylančių ryškiai aukščiau nei aplinkinės paviršiaus sritys, atsiradimu.

2.3 Darbo naujumas

Savybės skalės keitimo atžvilgiu, nors ir gana plačiai tyrinėtos panašiuose modeliuose, yra mažai ištirtos šioje disertacijoje nagrinėjamo gKS modelio atveju.

Disertacijos autoriaus gauti paviršiaus šiurkštumo sąryšiai su sistemos dydžiu šiam modeliui gauti pirmą kartą. Trijų kokybiškai skirtingų skeilingo atvejų išvedimas iš tos pačios struktūrinio faktoriaus funkcinės formos nebuvo tiesiogiai suformuluotas ankstesniuose darbuose paviršių augimo tematika. Geometrinis samprotavimas, padedantis netiesiogiai įvertinti smulkiosios paviršiaus struktūros charakteringąjį ilgį nefigūruoja ligšioliniuose paviršių tyrimuose.

Darbe panaudotos gerokai ilgesnės nei ankstesniuose darbuose pateikiamos skaitmeninio modeliavimo realizacijos leido autoriui nagrinėti didelių gKS sistemų dinamiką ilgais laikais ir tokiu būdu gauti naujų rezultatų iš šio modelio. Paviršių ilgalaikės dinamikos savybėms ir laiko skalėms tirti panaudotas globalių dydžių kinetikos analizės metodas, panašus į fluidų dinamikos tyrimuose naudojamus metodus, yra naujas paviršių augimo modelių tyrimuose. Šiuo metodu gauti sąryšiai tarp erdvės ir laiko skalių šiame modelyje. Ilgalaikės dinamikos tyrimai taip pat leido atrasti anksteniuose tyrimuose nestebėtą spontanišką lokalių struktūrų susidarymą, sąlygojantį staigų sistemos elgesio pokytį.

2.4 Disertacijos struktūra

Vaido Juknevičiaus disertaciją „Erdvinis ir laikinis elgesys paviršių augimo kontinuumo modeliuose" (angl. „Spatio-temporal behavior in continuum surface growth models") sudaro pratarmė, devyni skyriai, literatūros sąrašas ir autoriaus publikacijų bei pranešimų mokslinėse konferencijose sąrašas. Darbe cituojami 77 literatūros šaltiniai.

Pirmajame – įvadiniame – disertacijos skyriuje pateikiamas tyrimo objektas ir formuluojama nagrinėjama problema, trumpai apžvelgiami pagrindiniai kitų mokslininkų darbai šioje srityje, apibrėžiamas darbo tikslas ir iš jo išplaukiantys uždaviniai, nurodomi mokslinis darbo naujumas ir reikšmė.

Antrajame skyriuje detaliai pristatomas fizikinis amorfinių paviršių augimo modelis ir išvedama darbe nagrinėjama šį modelį aprašanti apibendrintoji Kuramoto-Sivashinsky (gKS) lygtis.

Pagrindiniai rezultatai pateikiami trečiajame–aštuntajame disertacijos skyriuose.

Trečiajame skyriuje išvedama bedimensė gKS lygties forma ir parodoma, kad ji turi vienintelį nepriklausomą parametrą, kuris ribiniais atvejais duoda anksčiau žinomus stacionarų KS ir nestacionarų cKS modelius. Šiame skyriuje taip pat aptariamas gKS modelio realizacijos pradžioje vykstantis pereinamasis šiurkštėjimo procesas, ir nagrinėjamame parametrų ruože stebimas įsisotinimas – perėjimas į stacionarų režimą, kuris aprariamas vėlesniuose skyriuose.

Ketvirtajame disertacijos skyriuje pristatomi statistiniai parametrai, naudojami netvarkių paviršių struktūrai charakterizuoti: paviršiaus aukščio skirtinys, aukščio autokoreliacijos funkcija ir erdvinis spektras (struktūros faktorius). Čia taip pat parodoma, kaip struktūrinio faktoriaus forma susijusi su paviršiaus šiurkščio priklausomybe nuo sistemos dydžio. Iš prielaidos apie laipsninę erdvinio spektro formą mažiems bangos skaičiams, liudijančią apie lėtų aukščio variacijų saviafiniškumą, gaunamos paviršiaus šiurkštumo savybės skalės kitimo atžvilgiu ir parodoma, kad pastarosios puikiai atitinka gKS modelio duodamus rezultatus.

Penktajame skyriuje aptariamos smulkiosios paviršiaus struktūros, sudarytos iš netvarkių, tačiau panašaus dydžio, kalniukų. Nagrinėjant sąsajas tarp paviršiaus ploto, šiurkščio ir charakteringo kalniukų dydžio, gaunamas geometrinis sąryšis, atskleidžiantis skirtingiems lygties parametrams gaunamų skirtingo grubumo struktūrų geometrinį panašumą ir padedantis netiesiogiai įvertinti charakteringąjį smulkiosios struktūros ilgį (kalniuko dydį), neskaičiuojant struktūrinio faktoriaus.

Šeštasis ir septintasis skyriai pristato paviršių dinamikos ilgais laikais tyrimus nagrinėjant paviršiaus šiurkštumo kinetikos laiko eilutes, jų autokoreliacijos funkcijas bei spektrus. Pastarieji yra apibendrintosios Lorenco formos, t.y., turintys laipsninę formą, iš apačios ribojamą charakteringo apatinio dažnio. Parodoma, kad šis chrakteringasis dažnis, atvirkščiai proporcingas lėčiausiai dinamikos laiko skalei, su žemiausiu sistemos talpinamu bangos skaičiumi, atvirkščiai proporcingu sistemos dydžiui, susiję̨s laipsniniu sąryšiu. Taigi parodoma, kaip Taip pat parodoma, kad minėtos tendencijos negalioja mažesnėms sistemoms, kai lygties parametro vertė yra pakankamai didelė, dėl šiais atvejais pasireiškiančios gerokai lėtesnės smulkiosios paviršių struktūros, kuri užgožia silpną lėtųjų aukščio variacijų dinamiką.

Paskutiniame, devintajame, disertacijos skyriuje yra apibendrinami gauti rezultatai ir jais remiantis padaromos išvados. Disertacijos pabaigoje pridedamas darbe cituotos literatūros sąrašas, taip pat išvardinti disertanto doktorantūros studijų metu publikuoti moksliniai straipsniai, perskaityti konferencijų pranešimai ir išryškintas disertanto asmeninis indėlis į disertacijoje aprašytus mokslinius rezultatus.

3 Disertacijos turinys ir pagrindiniai rezultatai

Šiame skyriuje trumpai pristatomi pagrindiniai disertacijoje pateikiami rezultatai.

3.1 Plonų amorfinių sluoksnių augimo modelis

Antrajame disertacijos skyriuje išsamiai pristatomas amorfinių sluoksnių augimo modelis. Pradedant nuo bendros išraiškos paviršiaus aukščiui $H(\boldsymbol{r}, t)$,

$$\partial_t H(\boldsymbol{r}, t) = G[H, \{\nabla^k H\}, \boldsymbol{r}, t] + I(\boldsymbol{r}, t), \tag{4}$$

kur G yra funkcionalas, galintis priklausyti nuo absoliutaus aukščio H, visų jo išvestinių ir jų kombinacijų $\{\nabla^k H\}$, koordinačių $\boldsymbol{r}$ bei laiko t, o I – ant paviršiaus nusėdančių dalelių srautas.

Pritaikant modelio prielaidas, postuluojančias pastovų homogenišką žemos energijos nusėdančių dalelių srautą, statmeną plokščiam pagrindui ir fizikines simetrijas, tokias kaip

- relaksacijos procesų paviršiuje stacionarumas bei izotropiškumas,
- invariantiškumas poslinkių statmenai bei lygiagrečiai plokščiam pagrindui atžvilgiu,

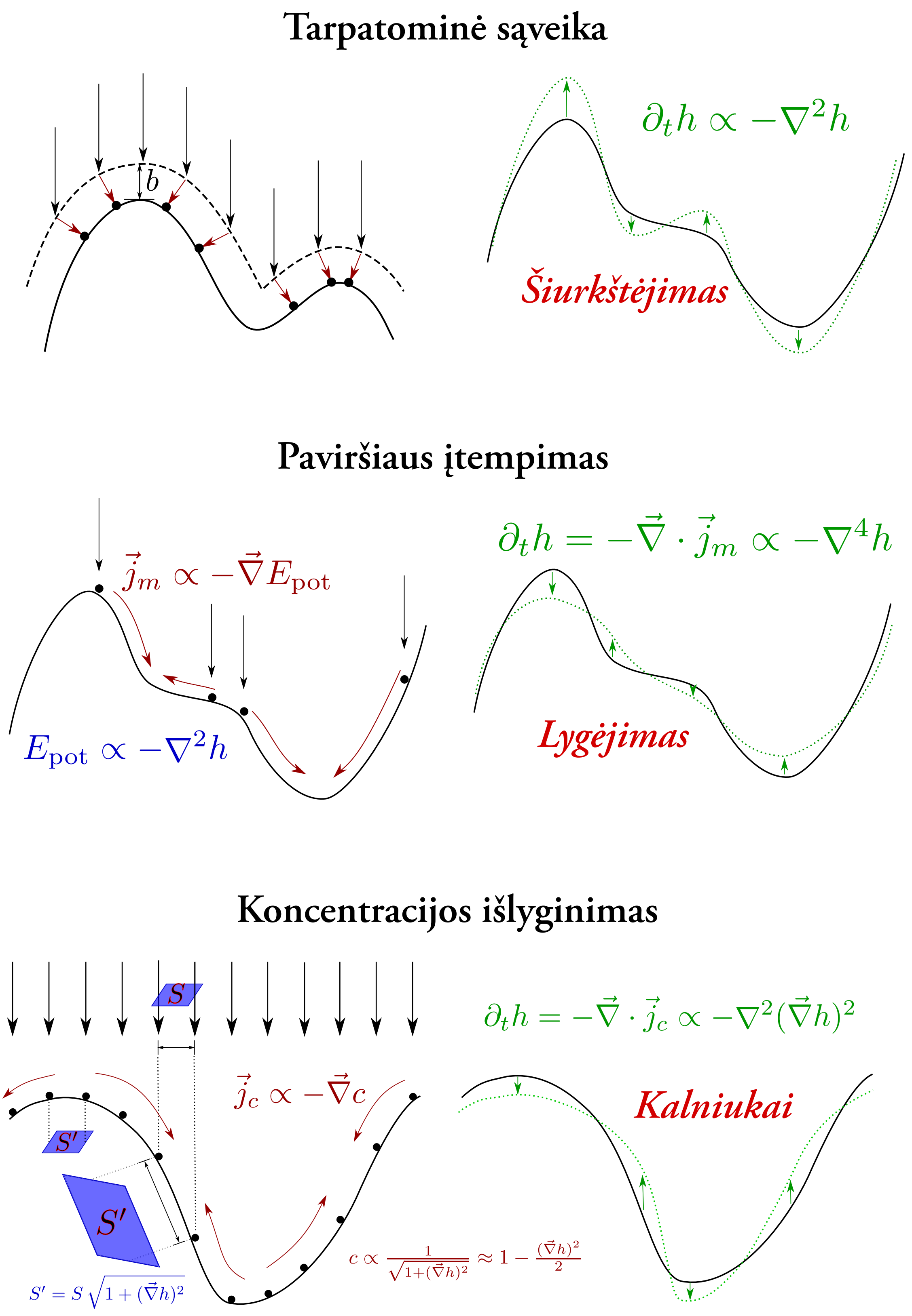
atlikus koordinačių transformaciją ir išskleidus funkcionalą iki antro laipsnio narių aukščio atžvilgiu ir iki 4 eilės erdvinių išvestinių, galiausiai gaunama netiesinė stochastinė dalinių išvestinių lygtis aukščio profiliui h

$$\partial_t h = a_1 \nabla^2 h + a_2 \nabla^4 h + a_3 \nabla^2 (\nabla h)^2 + a_4 (\nabla h)^2 + \eta\,, \tag{5}$$

kurioje η yra erdvėje ir laike nekoreliuoto Gauso triukšmo narys.

Lygtis (6) yra apibendrintoji stochastinė Kuramoto-Sivashinsky lygtis (ngKS). Koeficientai $\{a_i\}$ prie lygties narių yra susiję su modelio aprašomais fizikiniais procesais, kurie apibrėžia šių koeficientų ženklus ir susieja jų vertes su fiziniais dydžiais.

Modelio negrinėjami fizikiniai procesai ir jų indėliai į paviršiaus formavimąsi schematiškai pavaizduoti 1 pav. Iš šių procesų gaunami lygties (6)koeficientų ženklai: a_1, a_2 , $a_3 < 0$ ir $a_4 > 0$.



1 pav. Schematiškai atvaizduoti pagrindiniai plonų sluoksnių augimo modelio aprašomi procesai, jų sąlygojami modelio lygties nariai ir jų vaidmuo paviršiaus struktūros formavime.

3.2 Deterministinė gKS lygtis

Lygties (6) išraiška vien su tiesiniais nariais dešinėje lygybės pusėje, kurių vienas atsakingas už struktūros šiurkštėjimą dėl tarpatominės sąveikos sąlygojamo nusėdančių dalelių trajektorijų užlinkimo, o kitas – už paviršiaus lygėjimą dėl įtempimo jėgų, kartu sukuria tiesinį nestabilumą, išskiriantį vieną labiausiai stiprinamą modą ir lemiantį eksponentinį paviršiaus augimą pradiniu pereinamuoju laikotarpiu (žr. 2 pav.), kol paviršiaus aukščiai yra pakankamai maži, ir tiesiniai nariai turi nykstamai mažą įtaką. Palyginimui, KPZ lygtis (3) tiesiniu nestabilumu nepasižymi – šioje lygtyje visos modos yra tiesiškai slopinamos, tad eksponentinis augimas negaunamas. Vietoje eksponentinio augimo, KPZ lygties atveju gaunamas laipsninio pobūdžio šiurštėjimas pereinamuoju laikotarpiu. Netiesinis narys $(\nabla h)^2$, esantis tiek gKS, tiek KPZ lygtyse yra atsakingas už paviršiaus augimo proceso įsisotinimą (žr. 2 pav.).

Tolesniame nagrinėjime atsisakoma stochastinio nario η, mat jis, jei yra pakankamai mažas, esmingai nelemia susidarančių paviršiaus struktūrų savybių. Taigi nuo trečiojo disertacijos skyriaus iš esmės naudojama tik deterministinė lygtis

$$\partial_t h = a_1 \nabla^2 h + a_2 \nabla^4 h + a_3 \nabla^2 (\nabla h)^2 + a_4 (\nabla h)^2 \,. \tag{6}$$

Šią lygtį, atsižvelgiant į koeficientų $\{a_i\}$ ženklus, galima suvesti į bedimensę formą, turinčią tik vieną napriklausomą parametrą $\alpha > 0$:

$$\partial_t h = -\nabla^2 h - \nabla^4 h - \alpha \nabla^2 (\nabla h)^2 + (\nabla h)^2 \,. \tag{7}$$

Tolesnėje darbo eigoje naudojama būtent ši gKS lygties forma. 3 pav. vaizduoja iš (7) simuliacijų gautus paviršių profilius skirtingoms neneigiamoms parametro α vertėms.

šio verčių intervalo galuose gaunami skirtingi ribiniai atvejai:

1. Paprastoji Kuramoto-Sivashinsky (KS) lygtis,

   $$\partial_t h = -\nabla^2 h - \nabla^4 h + (\nabla h)^2 \,, \tag{8}$$

   pasižyminti erdvėje ir laike chaotiška stacionaria dinamika, gaunama kai $\alpha = 0$, ir

2. Konservatyvioji Kuramoto-Sivashinsky (cKS) lygtis,

   $$\partial_t h = -\nabla^2 h - \nabla^4 h - \nabla^2 (\nabla h)^2 \,, \tag{9}$$

   sukurianti nestacionariai grubėjančias kalniukų pavidalo stuktūras, gaunama riboje, kai $\alpha \to \infty$, pritaikius kitokią skalių transformaciją.

3.3 Paviršių morfologijos charakterizavimas

Ketvirtasis disertacijos skyrius pristato statistinius dydžius, charakterizuojančius netvarkių paviršių morfologiją: aptariami paviršių aukščio skirstiniai, autokoreliacijos funkcijos bei struktūriniai faktoriai (erdviniai spektrai).

3.4 Lėtos aukščio variacijos

Lėtų aukščio variacijų pobūdį, esant fiksuotai lygties parametro vertei, nusako paviršiaus šiurkštumo kvadrato w^2 priklausomybė nuo sistemos dydžio L (arba N diskretizavimo žingsnio vienetais), 4 pav.

Postulavus laipsninę struktūrinio faktoriaus $S(k)$ formą mažiems bangos skaičiams,

$$S(k) = C\, k^{-\gamma} \;\text{ for }\; k < k_{\mathrm{s}}\,, \tag{10}$$

priklausomai nuo laipsnio γ vertės, gaunami trys kokybiškai skirtingi atvejai:

$$w^2(L) = \begin{cases} C_1 - C_2\, L^{-(1-\gamma)} & \text{kai} \quad \gamma < 1\,, \\ C \ln L + B & \text{kai} \quad \gamma = 1\,, \\ D_1 + D_2\, L^{\gamma-1} & \text{kai} \quad \gamma > 1\,, \end{cases} \tag{11}$$

didelėse skalėse $L \to \infty$ virstantys

$$w^2(L) \sim \begin{cases} \text{const} & \text{kai} \quad \gamma < 1\,, \\ \ln L & \text{kai} \quad \gamma = 1\,, \\ L^{\gamma-1} & \text{kai} \quad \gamma > 1\,. \end{cases} \tag{12}$$

Taigi laipsnininės struktūrinio faktoriaus formos prielaida (10) apjungia tris dažnai sutinkamus šiurkščio priklausomybės nuo sistemos dydžio atvejus:

- Asimptotiškai lygūs paviršiai, kai $\gamma < 1$.
- Logaritmiškai augantis šiurkščio kvadratas, kai $\gamma = 1$. Ši išraiška atitinka EW modelio elgesį.
- Šiurkštiems fraktaliniams paviršiams būdinga laipsninė šiurkščio priklausomybė nuo sistemos dydžio, gaunama daugumoje žinomų modelių, kai $\gamma > 1$.

3.5 Smulkioji struktūra

Smulkiosios gKS kuriamų paviršių struktūros, sudarytos iš panašaus dydžio netvarkiai išsidėsčiusių kalniukų. Tokios struktūros charakteringasis ilgis R_c apskaičiuojamas iš struktūrinio faktoriaus $S(k)$ bangos skaičiaus k_c, atitinkančio spektro maksimumą (6):

$$R_c = \frac{2\pi}{k_c}\,. \tag{13}$$

Kadangi paviršiaus plotas, šiurkštis (aukščio variacija) ir charakteringasis ilgis kalniukų pavidalo struktūroms yra susiję dydžiai. Pasitelkus geometrinius samprotavimus ir paprasto paviršiaus, sudaryto iš vienodų simetriškų kalnių (5 pav.), modelį ir priėmus prielaidą individualaus kalniuko paviršiaus plotui A_1,

$$A_1 \sim r^2\left(1 + B\left(\frac{h}{r}\right)^{\nu}\right)^{\frac{1}{\nu}}\,, \tag{14}$$

gaunama apytikslė išraiška, siejanti normuotą viso paviršiaus plotą a, kalniuko aukštį h ir jo radiusą r:

$$(a-1) \sim \left(\frac{h}{r}\right)^{\nu}. \tag{15}$$

Netvarkiems paviršiams, sudarytiems iš panašių kalniukų galima išvesti analogišką išraišką, siejančia paviršiaus šiurkštį w, charakteringąjį sistemos ilgį R_c bei normuotą paviršiaus plotą a (vidutinį paviršiaus plotą virš vienetinio ploto plokščio pagrindo srities):

$$(a-1) \sim \left(\frac{w}{R_c}\right)^{\nu}. \tag{16}$$

Atvaizdavus iš gKS simuliacijų tiesiogiai suskaičiuotas paviršiaus charakteristikas, 6 pav. matomas puikus atitikimas tarp suskaičiuotų dydžių ir iš paprasto samprotavimo gauto sąryšio plačiame lygties parametro verčių intervale, kuriame paviršiaus morfologija, iš pažiūros stipriai pakinta.

Pasinaudojus išraiška

$$a - 1 = B\left(\frac{w}{R_c}\right)^{\nu}, \tag{17}$$

galima įvertinti charakteringą sistemos ilgį iš paviršiaus ploto ir neskaičiuojant struktūrinio faktoriaus:

$$R_c \approx B^{1/\nu}\frac{w}{(a-1)^{1/\nu}}\,. \tag{18}$$

3.6 Stactionarioji šiurkščio dinamika

gKS lygties dinamika po įsisotinimo, esant mažoms teigiamoms parametrų vertėms, kaip ir KS lygties atveju yra stacionari, tačiau gaunamų lėtų paviršių aukščio variacijų savybės skalės kitimo atžvilgiu skiriasi nuo KS (ir nuo KPZ) lygties savybių. Nagrinėjamų sistemos dydžių intervale minėtosios savybės stipriai priklauso nuo lygties parametro.

Analizuojant paviršių struktūrą aprašančių globalių dydžių (pvz., paviršiaus šiurkštumo) kinetiką įvairiems sistemos dydžiams, gaunami sąryšiai tarp saviafininio pobūdžio lėtų aukščio variacijų laiko ir erdvės skalių. 7 pav. pavaizduota šiurkščio $w(t)$ dinamika ir laikiniai spektrai. Matome, kad spektrų formą gerai atitinka apibendrintosios Lorenco pavidalo funkcijos (pritaikytos brūkšninėmis linijomis 7 pav.). Taip pat matoma, kad charakteringasis žemutinis spektro užlinkimo dažnis f_0 nuo sistemos dydžiui atvirkščiai proporcingo žemiausio sistemoje telpančio bangos skaičiaus k_0 priklauso laipsniškai (žr. 8 pav.).

Gautieji sąryšiai yra laipsninio pabūdžio (žr. 8 pav.), o laipsnio rodikliai juose, susiję su sistemos dinaminiais rodikliais (angl., dynamical exponents), mažėja didinant gKS lygties parametrą.

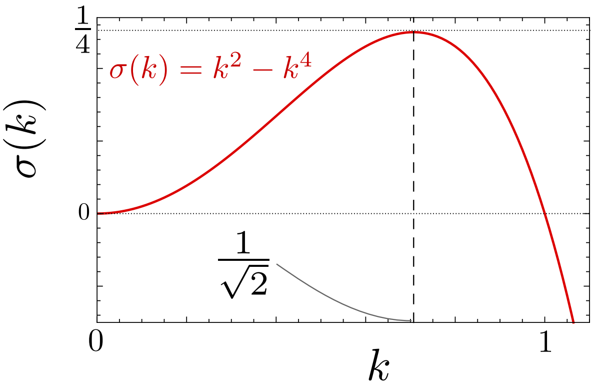
3.7 Nestacionarus elgesys ir lokalus grubėjimas

Esant didesnėms parametrų vertėms ($\alpha > 6$), stacionarus režimas užleidžia kelią nestacionariam elgesiui, kuris pasižymi stipriai besiskiriančia dinamika netgi skirtingoms realizacijoms su ta pačia parametro verte. Pastebima, į nestacionarų režimą, esant tarpinėms parametrų vertėms ($6.5 \leq \alpha \leq 106$), gali pereiti po gana ilgo laiko (žr. 9 pav.). Dinamika, kuri, iš pažiūros, atrodo stacionari – tokia, kokia gaunama, esant mažesnėms parametro vertėms – gali spontaniškai peršokti į nestacionarų režimą, pasižymintį staigiu paviršiaus šiurkšumo augimu, paviršiaus plotui tuo pat metu beveik nepakintant. Šie staigūs dinamikos pokyčiai susiję su lokalių struktūrų atsiradimu (žr. 9 pav.). Tokios struktūros atsiranda spontaniškai ir labai įvairiais laikais skirtingose realizacijose, kai keli aplink vieną tarpeklį išsidėstę kalniukai pradeda kartu augti greičiau nei aplinkinės paviršiaus sritys ir greitai savo dydžiu ima viršyti aplinkinius kalniukus. Toks elgesys iki šiol nebuvo stebėtas paviršių augimo modelių tyrimuose.

Bedimensė gKS lygtis

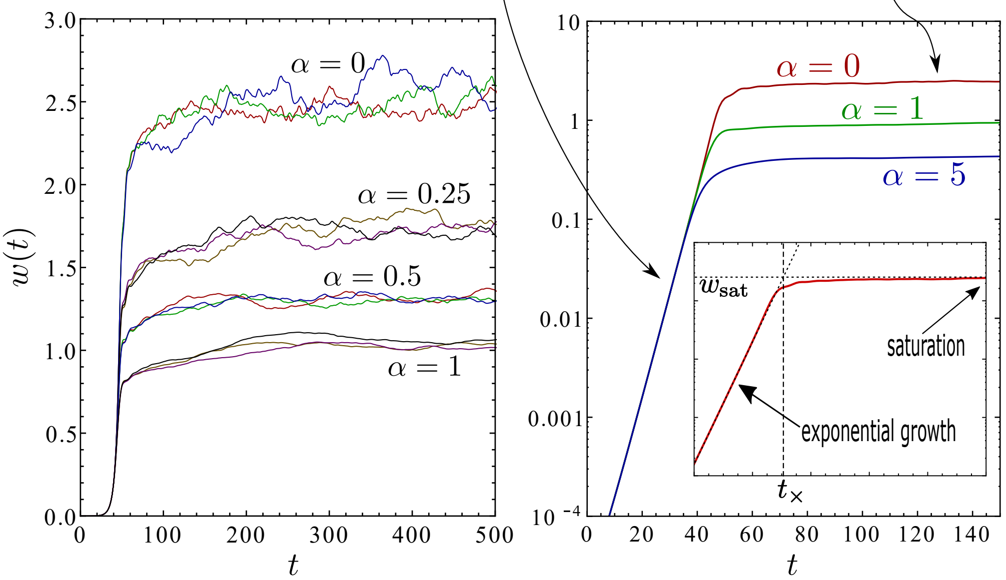
$$\partial_t h = -\nabla^2 h - \nabla^4 h - \alpha\nabla^2(\nabla h)^2 + (\nabla h)^2$$

Tiesinis nestabilumas

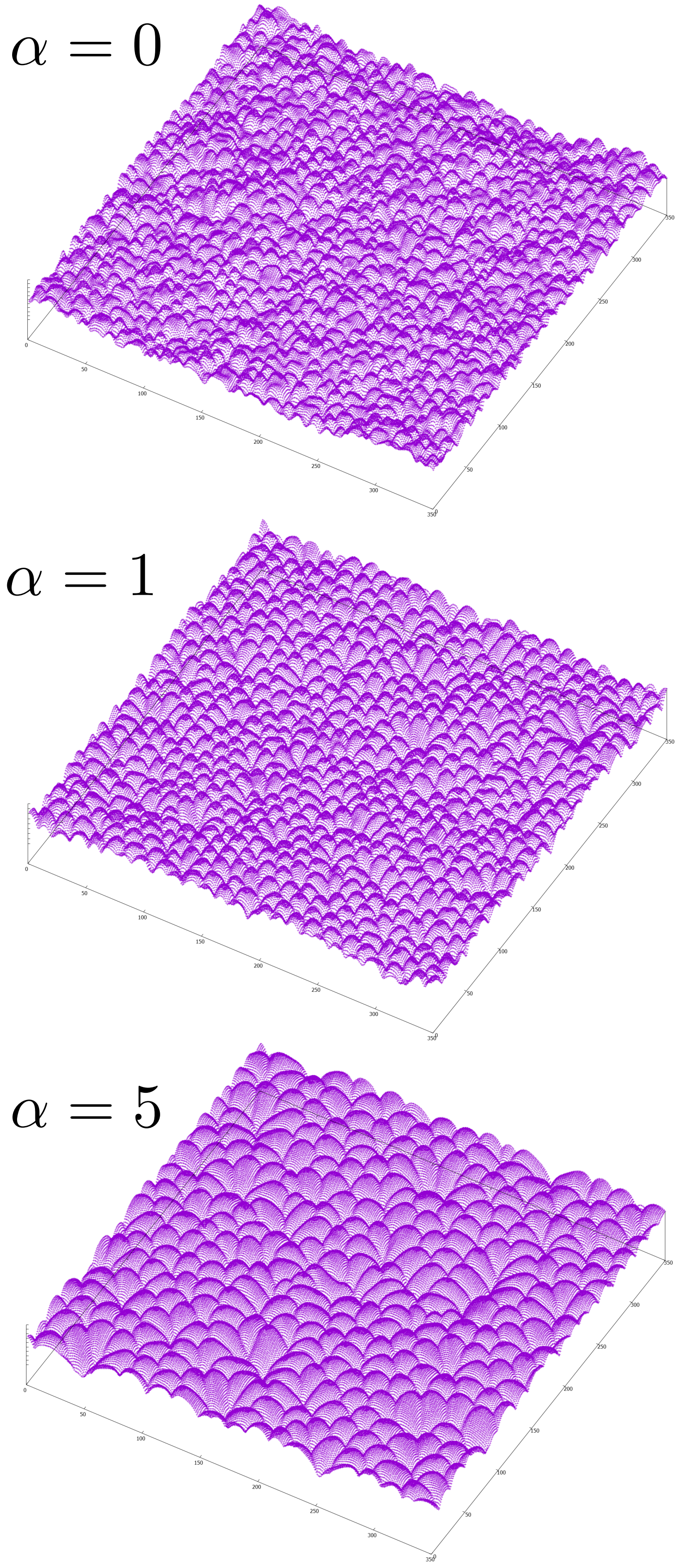


$$h_k(t) \propto \exp\left(\sigma(k)\, t\right)$$

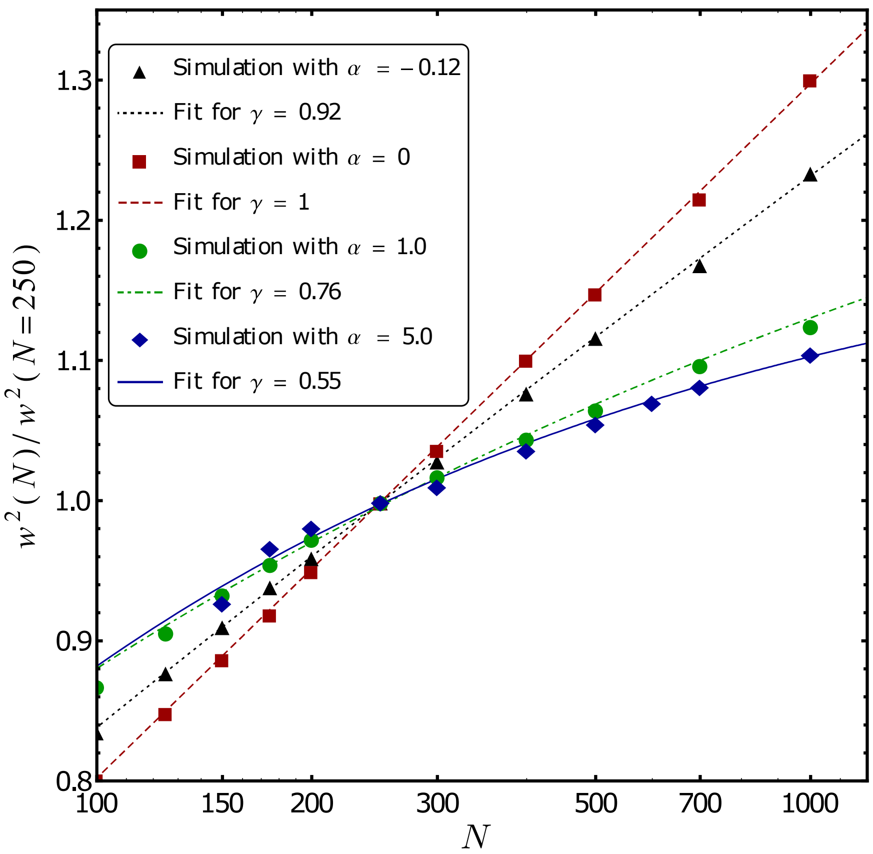
Eksponentinis šiurkštėjimas ir įsisotinimas

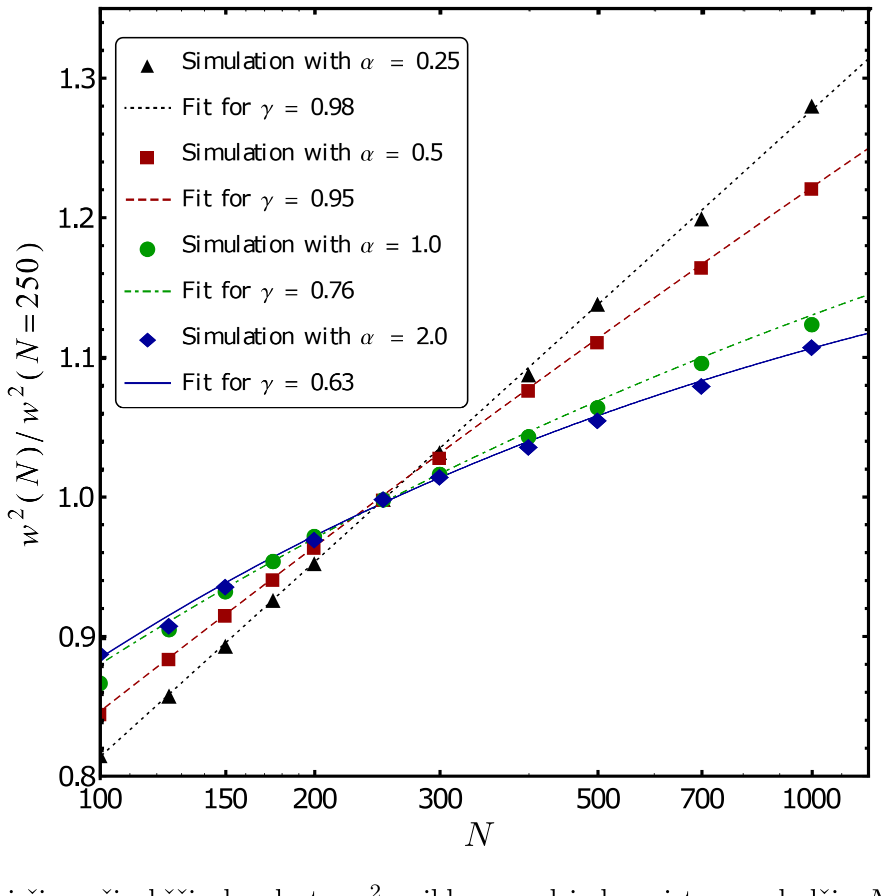


2 pav. gKS lygties tiesinių narių bendro poveikio sąlygojamas nestabilumas, lemiantis eksponentinį šiurkščio $w(t)$ augimą realizacijos pradžioje, ir netiesinio KPZ nario sąlygojamas kinetikos įsisotinimas.

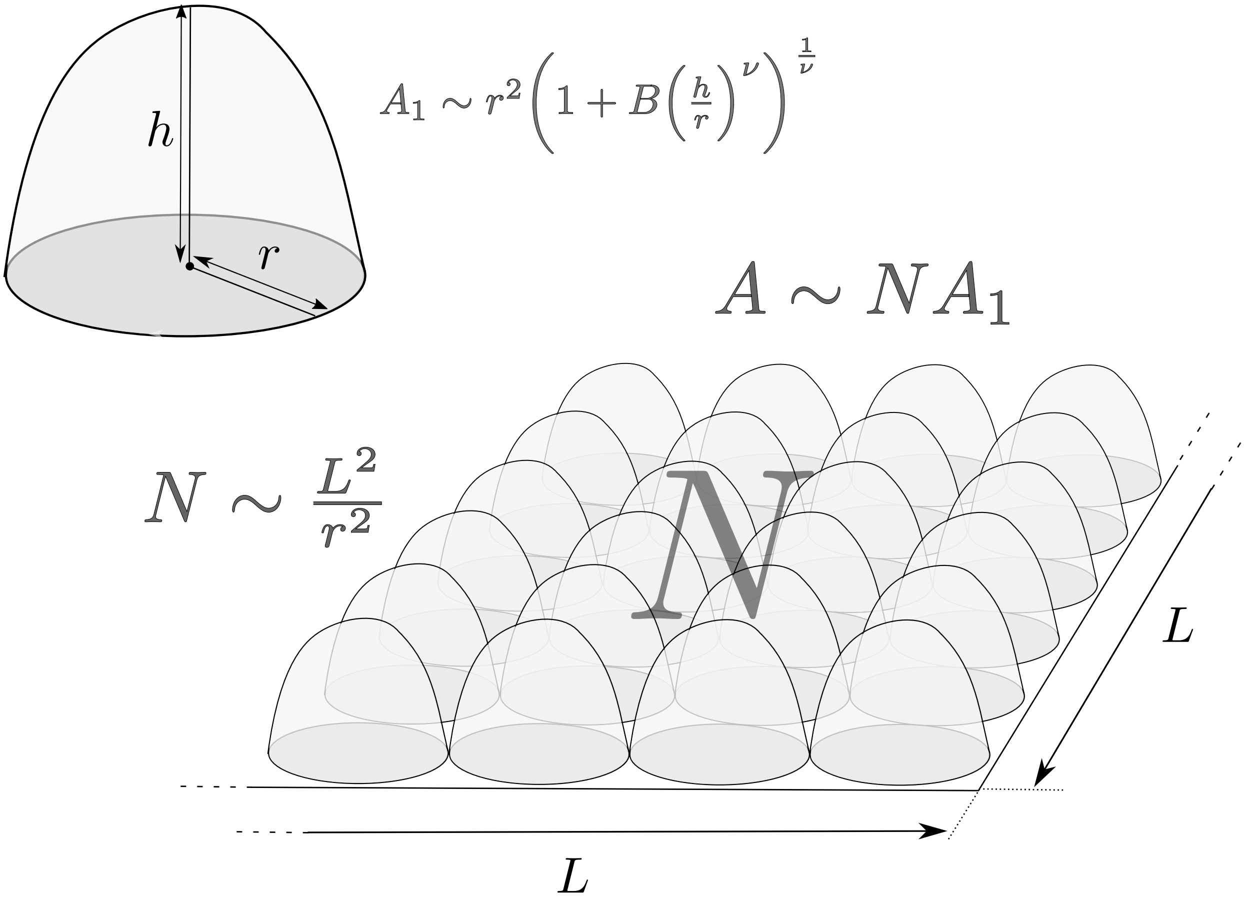


3 pav. Iš gKS modelio (1) gaunamų paviršių profiliai $h(\boldsymbol{r}, t)$ įsisotinimo režime skirtingoms parametro α vertėms.

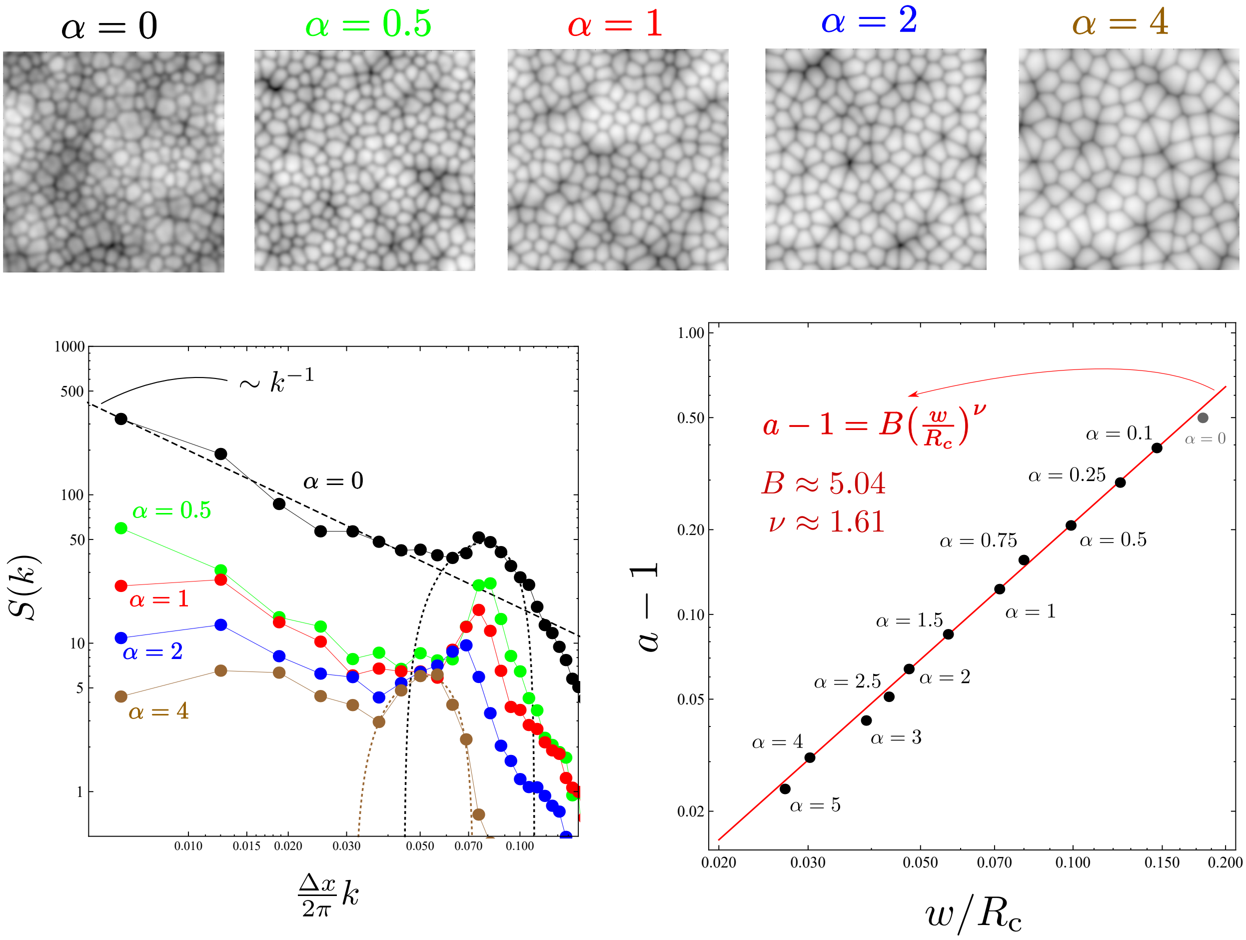




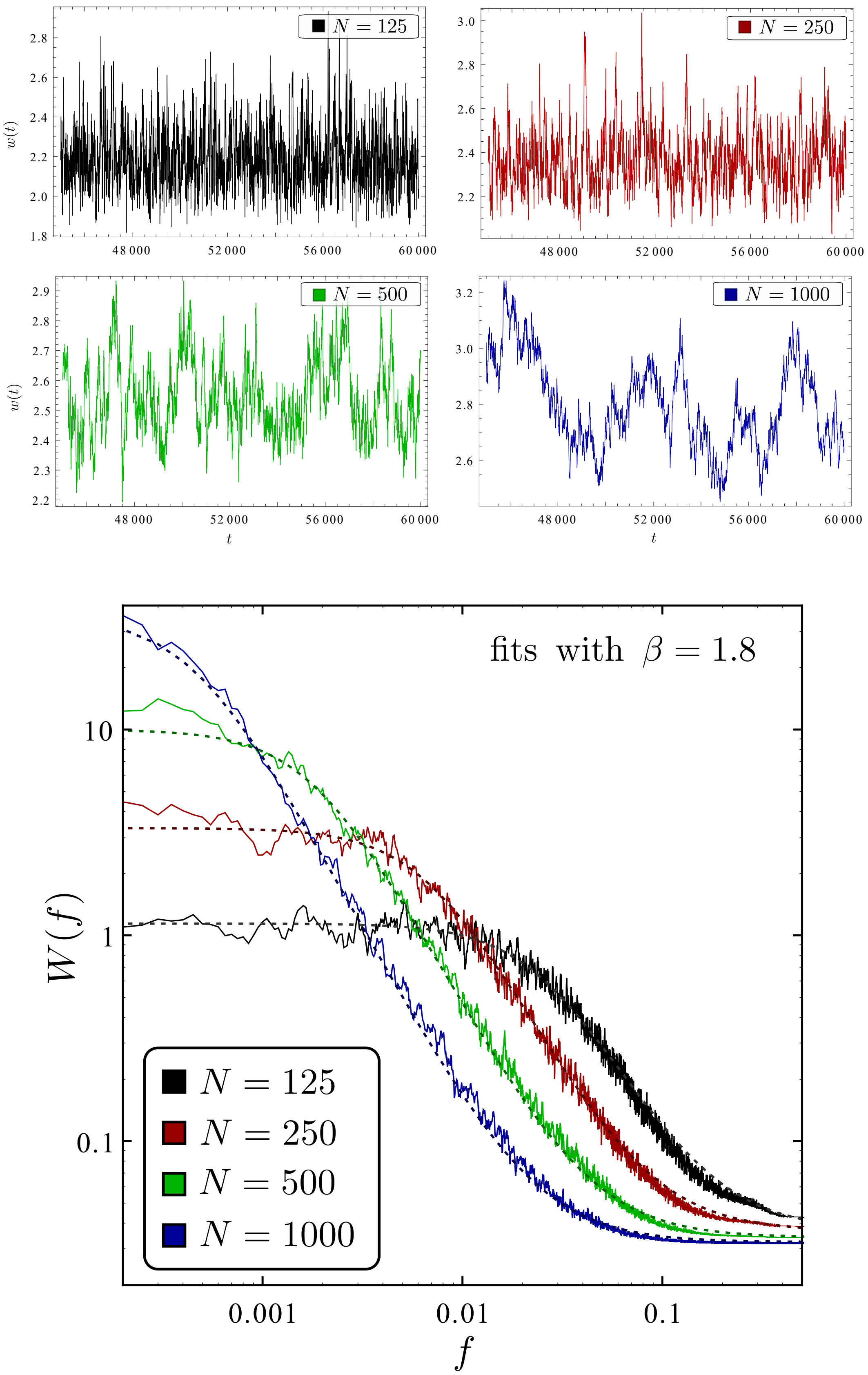
4 pav. Paviršiaus šiurkščio kvadrato w^2 priklausomybė duo sistemos dydžio N įvairioms gKS lygties (1) parametro α vertėms. Abscisių ašies skalė parinkta logaritminė, o ordinačių – tiesinė, todėl tiesios linijos atitinka logaritminę priklausomybę $w^2 \sim \log N$.



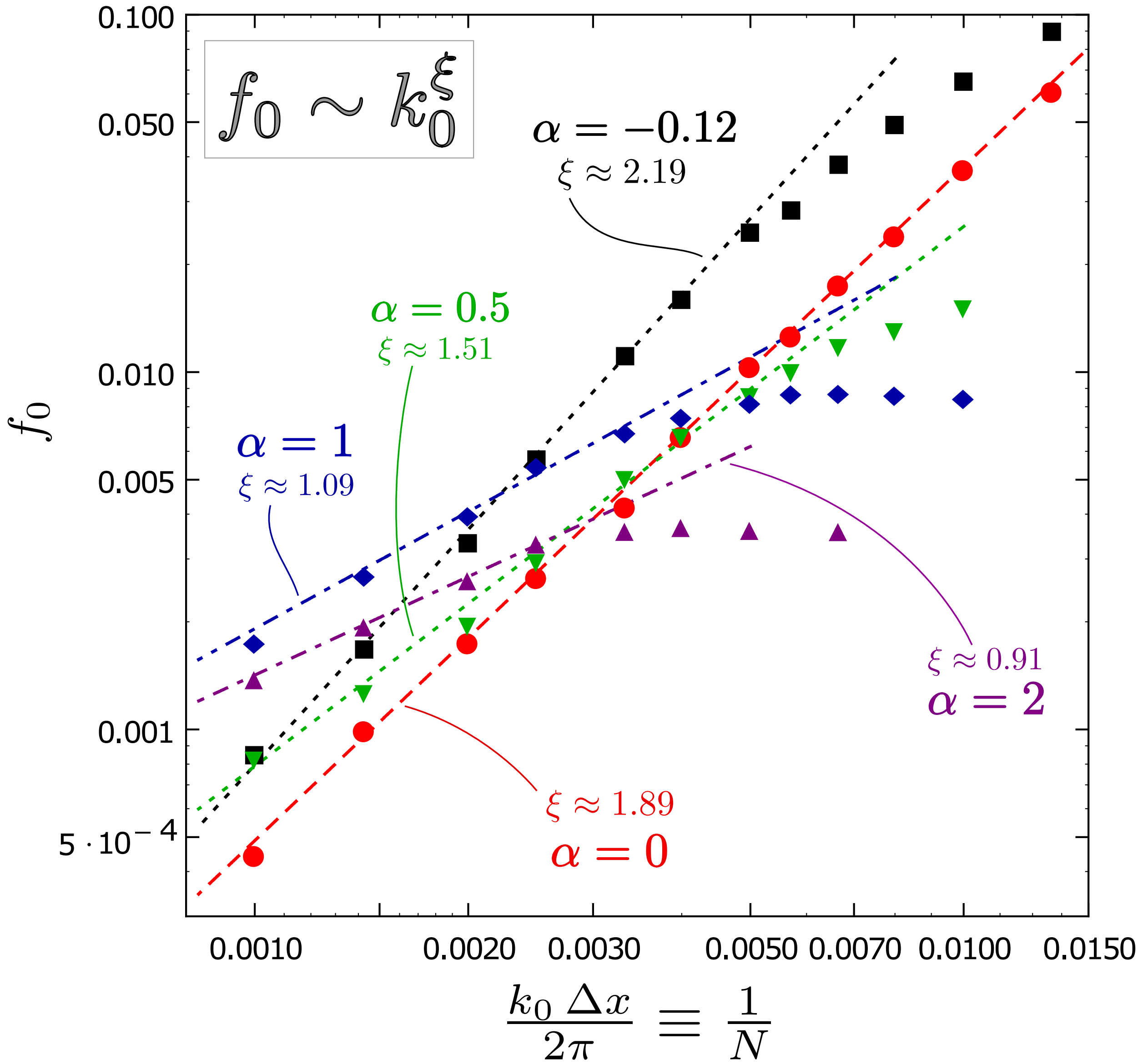
5 pav. Schema, iliustruojanti geometrinius samprotavimus, vedančius prie paviršiaus šiurkšččio, ploto ir charakteringojo ilgio sąryšio.



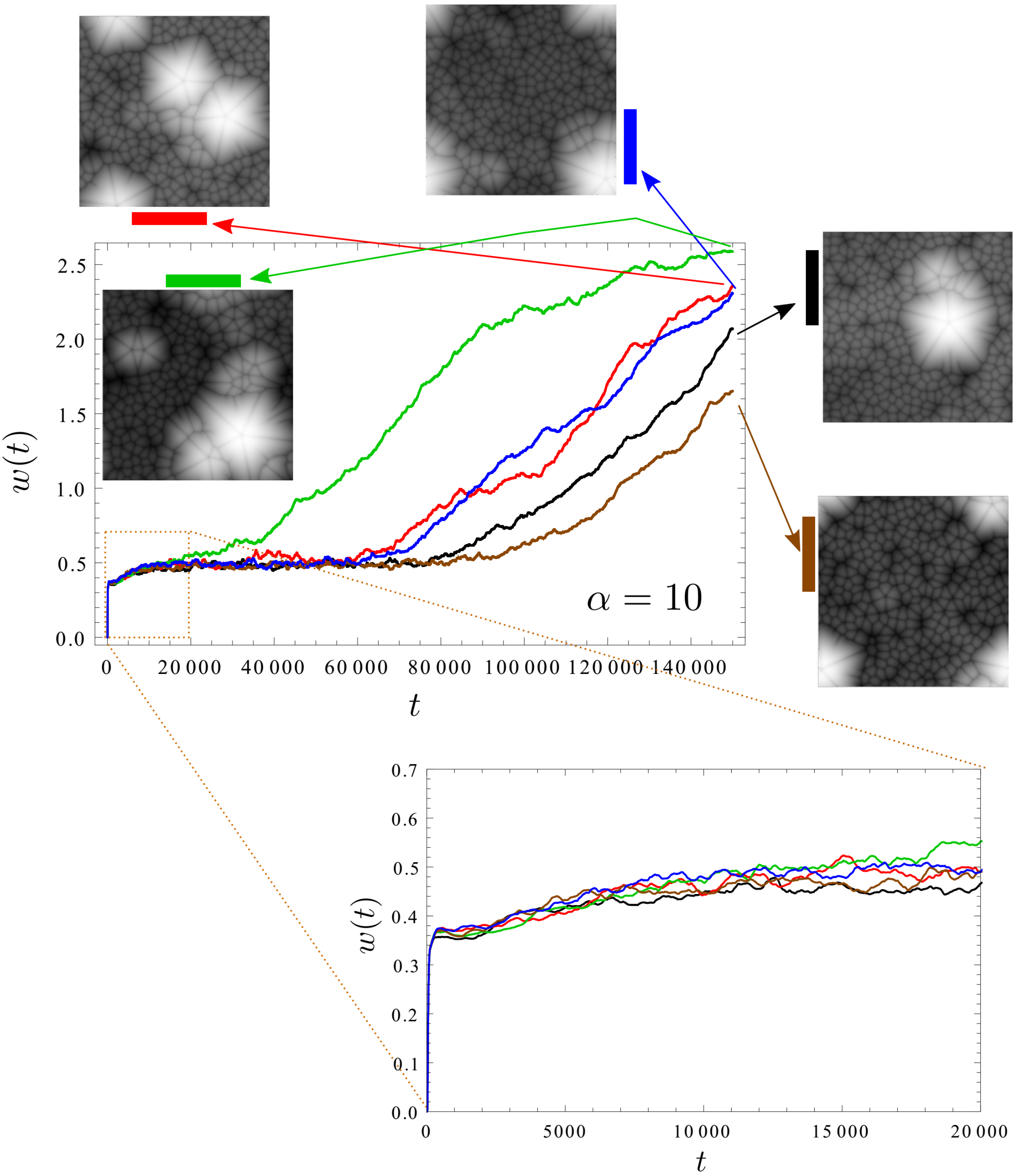
6 pav. Viršuje: paviršių morfologijos skirtingoms parametro α vertėms. Apačioje kairėje: erdviniai viršuje atvaizduotų paviršių spektrai bei charakteringojo ilgio struktūroje (vidutinio kalniuko dydžio) nustatymas pagal spektrų smailes. Apačioje dešinėje: tiesiogiai suskaičiuoti rezultatai (juodi taškai) ir iš geometrinio samprotavimo išplaukiantis sąryšis (raudona linija).



7 pav. Viršuje: trumpos paviršiaus šiurkščio $w(t)$ kinetikos atkarpos KS atveju (kai $\alpha = 0$) įvairiems sistemos dydžiams N. Apačioje: atitinkami galios spektrai.



8 pav. Žemiausio charakteringojo dažnio f_0 priklausomybė nuo mažiausio bangos skaičiaus k_0 (atvaizduota logaritminėse skalėse). Simboliai: skaičiavimų – rezultatai, linijos – laipsninės aproksimacijos mažiems bangos skaičiams.



9 pav. Nestacionari paviršių dinamika ir susidarančios stambios lokalios struktūros penkioms skirtingoms realizacijoms, kai $\alpha = 10$.

4 Išvados

Šiame skyrelyje apibendrinami šiame darbe pristatyti rezultatai ir suformuluojamos išvados, remiančios disertacijos ginamuosius teiginius.

Iš darbe gautų rezultatų galima pateikti šias pagrindines išvadas:

1. Plonų amorfinių sluoksnių augimo kontinuumo modelio, aprašomo dvimate apibendrintąja Kuramoto-Sivashinsky (gKS) lygtimi, generuojamų paviršių struktūra susidaro iš netvarkių ląstelinių raštų, turinčių charakteringą ilgį, mažose skalėse ir iš lėtų saviafininio pobūdžio aukščio variacijų, pasireiškiančių didelėse sistemose. Tik pastarosios gali būti nagrinėjamos universalumo atžvilgiu.

2. Gaunamų paviršių dinamika ir statistinės savybės yra nulemtos vienintelio nepriklausomo gKS lygties parametro. Atskiru atveju, kai šio parametro vertė lygi nuliui, gaunama Kuramoto-Sivashinsky (KS) lygtis, kurianti erdvėje ir laike chaotišką, tačiau stacionarią paviršiaus evoliuciją. Esant mažoms teigiamoms parametrų vertėms, gKS lygtis taip pat pasiekia stacionarų chaotinį režimą, tačiau šiuo atveju gaunamos labiau išreikštos kalniukų pavidalo struktūros, o charakeringas kalniuko dydis priklauso nuo parametro vertės – didesnėms parametro vertėms gaunamos grubesnės struktūros. Lėtos aukščio variacijos didelėse skalėse išlaiko saviafininį pobūdį, tačiau tampa gerokai mažiau išreikštos lyginant su smulkiąja struktūra.

3. Iš skaitmeninio modeliavimo rezultatų gauti paviršiaus šiurkštumo sąryšiai su sistemos dydžiu indikuoja laipsninę struktūrinio faktoriaus (erdvinio spektro) formą mažiems bangos skaičiams, o tai reiškia jog gKS modeliu aprašomų paviršių aukščio variacijos didelėse skalėse pasižymi saviafiniškumo savybėmis. Paviršiaus spektro laipsniai nagrinėjamame sistemos dydžių intervale priklauso nuo lygties parametro. Tai rodo, jog asimptotinis elgesys, neturintis priklausyti nuo lygties parametro, nagrinėjamiems sistemos dydžiams nėra pasiekiamas, o net ir labai didelių baigtinių matmenų sistemų savybes gKS atveju geriau aprašo autoriaus pasiūlyti sąryšiai.

4. Kaip paminėta aukščiau, tam tikram parametro verčių intervalui, gaunamas nusistovėjęs paviršiaus režimas, pasižymintis stacionaria dinamika. Šiame režime galima skaičiuoti paviršių erdvinį ir laikinį elgesį aprašančius statistinius dydžius. Įsisotinimo

režime gauti rezultatai rodo, kaip, didinant lygties parametrą, paviršių aukščio skirstiniai keičiasi nuo simetriškų normaliojo (Gauso) pavidalo iki neigiama asimetrija pasižyminčių skirstinių. Tai susiję su smulkiosios struktūros grubėjimu, užgožiančiu lėtas aukščio variacijas. Paviršiaus grubėjimą galima stebėti kaip charakteringo struktūros ilgio didėjimą, įvertinamą iš paviršių erdvinių spektrų (aukščių autokoreliacijos funkcijų) smailių poslinkio mažesnių bangos skaičių (didesnių atstumų) kryptimi. Paprastais geometriniais samprotavimais gauti sąryšiai tarp paviršiaus šiurkštumo, charakteringo ilgio bei paviršiaus ploto rodo gerai atitinka skaitmeninio modeliavimo rezultatus, parodydami, kad vidutinė netvarkiai išsidėsčiusių kalniukų forma yra panaši įvairioms parametrų vertėms. Remiantis tais pačiais samprotavimais, galima netiesiogiai, tačiau gerokai greičiau įvertinti iš panašių kalniukų sudaryto paviršiaus struktūros charakteringąjį ilgį.

5. Analitiniai skaičiavimai rodo, kad riboje kai parametro vertė artėja į begalybę, pritaikius paprastą transformaciją, gaunama konservatyvioji Kuramoto-Sivashinsky (cKS) lygtis, pasižyminti nestacionaria dinamika ir nuolat grubėjančia kalniukų struktūra bei laike augančiu paviršiaus šiurkštumu. Taigi didinant lygties parametrą, galima tikėtis nestacionarios dinamikos. Būtent tai ir parodo gauti skaitmeninio modeliavimo rezultatai: esant didesnėms parametro vertėms, paviršių dinamika tampa nestacionari.

6. Didinant parametrų vertes, stacionarus režimas užleidžia kelią nestacionariam elgesiui, kuris gali duoti gerokai besiskiriančią dinamiką netgi skirtingoms realizacijoms su ta pačia parametro verte. Pastebima, kad nestacionarus režimas tarpinėms parametrų vertėms gali „įsijungti" po gana ilgo laiko. Dinamika, kuri, iš pažiūros, atrodo stacionari – tokia, kokia gaunama, esant mažesnėms parametro vertėms – gali šuoliškai pereiti į nestacionarų režimą, pasižymintį staigiu paviršiaus šiurkšumo augimu, paviršiaus plotui tuo pat metu beveik nepakintant. Šie staigūs dinamikos pokyčiai susiję su lokalių struktūrų atsiradimu. Tokios struktūros atsiranda spontaniškai ir labai įvairiais laikais skirtingose realizacijose, kai keli aplink vieną tarpeklį išsidėstę kalniukai pradeda kartu augti greičiau nei aplinkinės paviršiaus sritys ir greitai savo dydžiu ima viršyti aplinkinius kalniukus. Toks elgesys iki šiol nebuvo stebėtas paviršių augimo modelių tyrimuose.

Literatūra

1. V. Juknevicius, Long range height variations in surface growth, The European Physical Journal B **89**(2), 1–8 (2016).

2. V. Juknevičius, J. Ruseckas, J. Armaitis, Large scale spatio-temporal behaviour in surface growth, The European Physical Journal B **90**(9), 163 (2017).

3. M. Raible, S. Mayr, S. Linz, M. Moske, K. Samwer, et al., Amorphous thin-film growth: Theory compared with experiment, EPL (Europhysics Letters) **50**(1), 61 (2000).

4. M. Raible, S. J. Linz, P. Hänggi, Amorphous thin film growth: Effects of density inhomogeneities, Physical Review E **64**(3), 031506 (2001).

5. M. Raible, S. J. Linz, P. Hänggi, Growth instabilities of vapor deposited films: atomic size versus deflection effect, The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems **27**(3), 435–442 (2002).

6. R. Cuerno, A.-L. Barabási, Dynamic scaling of ion-sputtered surfaces, Physical review letters **74**(23), 4746 (1995).

7. T. Kim, C.-M. Ghim, H. Kim, D. Kim, D. Noh, N. Kim, J. Chung, J. Yang, Y. Chang, T. Noh, et al., Kinetic roughening of ion-sputtered pd (001) surface: beyond the kuramoto-sivashinsky model, Physical review letters **92**(24), 246104 (2004).

8. M. Castro, R. Cuerno, L. Vázquez, R. Gago, Self-organized ordering of nanostructures produced by ion-beam sputtering, Physical review letters **94**(1), 016102 (2005).

9. R. Gago, L. Vázquez, O. Plantevin, T. H. Metzger, J. Muñoz-García, R. Cuerno, M. Castro, Order enhancement and coarsening of self-organized silicon nanodot patterns induced by ion-beam sputtering, Applied physics letters **89** (2006).

10. R. Cuerno, M. Castro, J. Muñoz-García, R. Gago, L. Vázquez, Nanoscale pattern formation at surfaces under ion-beam sputtering: A perspective from continuum models, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **269**(9), 894–900 (2011).

11. J. Muñoz-García, R. Cuerno, M. Castro, Short-range stationary patterns and long-range disorder in an evolution equation for one-dimensional interfaces, Physical Review E **74**(5), 050103 (2006).

12. J. Muñoz-García, R. Gago, L. Vázquez, J. A. Sánchez-García, R. Cuerno, Observation and modeling of interrupted pattern coarsening: surface nanostructuring by ion erosion, Physical review letters **104**(2), 026101 (2010).

13. G. Sivashinsky, Nonlinear analysis of hydrodynamic instability in laminar flames i. derivation of basic equations, Acta astronautica **4**(11-12), 1177–1206 (1977).

14. D. Michelson, G. Sivashinsky, Nonlinear analysis of hydrodynamic instability in laminar flames ii. numerical experiments, Acta Astronautica **4**(11-12), 1207–1221 (1977).

15. G. Sivashinsky, On self-turbulization of a laminar flame, Acta Astronautica **6**(5-6), 569–591 (1979).

16. Y. Kuramoto, *Chemical oscillations, waves, and turbulence* (Springer-Verlag, 1984).

17. K. Sneppen, J. Krug, M. Jensen, C. Jayaprakash, T. Bohr, Dynamic scaling and crossover analysis for the kuramoto-sivashinsky equation, Physical Review A **46**(12), R7351 (1992).

18. C. Jayaprakash, F. Hayot, R. Pandit, Universal properties of the two-dimensional kuramoto-sivashinsky equation, Physical review letters **71**(1), 12 (1993).

19. B. M. Boghosian, C. C. Chow, T. Hwa, Hydrodynamics of the kuramoto-sivashinsky equation in two dimensions, Physical Review Letters **83**(25), 5262 (1999).

20. M. Paniconi, K. Elder, Stationary, dynamical, and chaotic states of the two-dimensional damped kuramoto-sivashinsky equation, Physical Review E **56**(3), 2713 (1997).

21. M. Rost, J. Krug, Anisotropic kuramoto-sivashinsky equation for surface growth and erosion, Physical review letters **75**(21), 3894 (1995).

22. K. B. Lauritsen, R. Cuerno, H. A. Makse, Noisy kuramoto-sivashinsky equation for an erosion model, Physical Review E **54**(4), 3577 (1996).

23. K. Dreimann, S. J. Linz, Continuum modeling of ion-beam eroded surfaces under normal incidence: Impact of stochastic fluctuations, Chemical Physics **375**(2), 606–611 (2010).

24. C. Diddens, S. J. Linz, Continuum modeling of particle redeposition during ion-beam erosion, The European Physical Journal B **86**(9), 1–13 (2013).

25. C. Diddens, S. J. Linz, Continuum modeling of particle redeposition during ion-beam erosion, The European Physical Journal B **88**(7), 1–22 (2015).

26. V. Yakhot, Large-scale properties of unstable systems governed by the kuramoto-sivashinksi equation, Physical Review A **24**(1), 642 (1981).

27. I. Procaccia, M. H. Jensen, V. S. L'vov, K. Sneppen, R. Zeitak, Surface roughening and the long-wavelength properties of the kuramoto-sivashinsky equation, Physical Review A **46**(6), 3220 (1992).

28. M. Kardar, G. Parisi, Y.-C. Zhang, Dynamic scaling of growing interfaces, Physical Review Letters **56**(9), 889 (1986).

29. M. J. Vold, Computer simulation of floc formation in a colloidal suspension, Journal of Colloid Science **18**(7), 684–695 (1963).

30. F. Family, T. Vicsek, Scaling of the active zone in the eden process on percolation networks and the ballistic deposition model, Journal of Physics A: Mathematical and General **18**(2), L75 (1985).

31. S. Wolfram, Cellular automaton fluids 1: Basic theory, Journal of statistical physics **45**(3), 471–526 (1986).

32. U. Frisch, B. Hasslacher, Y. Pomeau, Lattice-gas automata for the navier-stokes equation, Physical review letters **56**(14), 1505 (1986).

33. B. J. Wylie, Application of two-dimensional cellular automaton lattice-gas models to the simulation of hydrodynamics (1990).

34. J.-P. Rivet, J. P. Boon, *Lattice gas hydrodynamics*, volume 11 (Cambridge University Press, 2005).

35. V. Juknevicius, J. Armaitis, Lattice gas automaton modelling of a vortex flow meter: Strouhal-reynolds number dependence, arXiv preprint arXiv:1701.08754 (2017).

36. V. L'vov, I. Procaccia, Comment on "universal properties of the two-dimensional kuramoto-sivashinsky equation", Physical review letters **72**(2), 307 (1994).

37. C. Jayaprakash, F. Hayot, R. Pandit, Jayaprakash, hayot, and pandit reply, Physical review letters **72**(2), 308 (1994).

38. M. Nicoli, E. Vivo, R. Cuerno, Kardar-parisi-zhang asymptotics for the two-dimensional noisy kuramoto-sivashinsky equation, Physical Review E **82**(4), 045202 (2010).

39. P. Manneville, H. Chaté, Phase turbulence in the two-dimensional complex ginzburg-landau equation, Physica D: Nonlinear Phenomena **96**(1), 30–46 (1996).

40. S. F. Edwards, D. Wilkinson, The surface statistics of a granular aggregate, in *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (The Royal Society, 1982), volume 381, 17–31.

41. T. Nattermann, L.-H. Tang, Kinetic surface roughening. i. the kardar-parisi-zhang equation in the weak-coupling regime, Physical Review A **45**(10), 7156 (1992).

Trumpos žinios apie disertacijos autorių

Bendrieji duomenys

Vardas ir pavardė:	Vaidas Juknevičius
Gimimo data:	1986-10-01
Gimimo vieta:	Vilniaus m.
Elektroninis paštas:	vaidas.juknevicius@tfai.vu.lt

Išsilavinimas

2012–2016 metais	Doktorantūros studijos Vilniaus universitete, Teorinės fizikos ir astronomijos institute.
2009–2012 metais	Fizikos magistro laipsnis, įgytas Miunsterio universitete, Vokietijoje (studijų programa – Physik, Master of Science). Studijoms stipendiją skyrė Vokietijos Akademinių mainų tarnyba (DAAD).
2005–2009 metais	Elektronikos inžinerijos bakalauro laipsnis, įgytas Vilniaus universitete, Fizikos fakultete (studijų programa – Telekomunikacijų fizika ir elektronika).

Darbo patirtis

Nuo 2017 m. birželio mėn.	Vyriausiasis seismologas Lietuvos geologijos tarnyboje prie Aplinkos ministerijos.
Nuo 2016 m. kovo mėn.	Jaunesnysis mokslo darbuotojas Vilniaus universitete, Teorinės fizikos ir astronomijos institute.
2011 spalis–2012 kovas	Dėstymo asistentas Miunsterio universitete (Vokietija).

Apdovanojimai

2014-02-20	Apdovanojimas (diplomas), skirtas Lietuvos Mokslų akademijos už vieną geriausių pranešimų 5-ojoje Jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai”.
2013-10-02	Lietuvos policijos įteiktas pilietiškumo apdovanojimas – diplomas „Už pagalbą policijai”. Padėta užkirsti kelią smurtiniam nusikaltimui ir sulaikyti nusikaltėlius.

Disertacijos autoriaus mokslinių darbų sąrašas

Mokslinės publikacijos

Disertacijos autoriaus doktorantūros metu atlikti tyrimai buvo paskelbti 3 straipsniuose, kurie publikuoti *ISI Web of Science* indeksuojamuose žurnaluose. Toliau pateikiamas publikacijų sąrašas atvirkštine chronologine tvarka (pradedant nuo naujausių).

A1. **V. Juknevicius**, J. Armaitis, J. Ruseckas, Large scale spatio-temporal behavior in surface growth, European Physical Journal B **90**(9) 163 (2017).

A2. **V. Juknevicius**, J. Armaitis, Lattice gas automaton modeling of a vortex flow meter: Strouhal-Reynolds number dependence, Lith. J. Phys. 56, 191–199 (2016).

A3. **V. Juknevicius**, Long range height variations in surface growth, European Physical Journal B **89**(2), 1-8 (2016).

Pranešimai konferencijose ir konferencijų tezės

Šioje disertacijoje aprašomi tyrimai buvo pristatyti 6 pranešimuose mokslinėse konferencijose. Iš jų 3 žodiniai ir 3 stendiniai pranešimai pristatyti disertacijos autoriaus. Toliau pateikiamas pranešimų sąrašas atvirkštine chronologine tvarka (pradedant nuo naujausių). Prie kiekvieno pranešimo yra nurodytas pranešėjas ir pranešimo tipas.

B1. V. Juknevičius, Long-range height variations and kinetics of roughness in surface growth, in *42-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija: Programa ir pranešimų tezės* (Vilnius, Lithuania, 2017), p. 106. // Stendinis pranešimas, pristatytas Vaido Juknevičiaus

B2. V. Juknevičius, Long range height variations in surface growth, in *Perspectives in Nonlinear Dynamics 2016* (Berlin, Germany, July 25-29 2016). // Žodinis pranešimas, pristatytas Vaido Juknevičiaus

B3. V. Juknevičius, Scaling in Generalized 2D Kuramoto-Sivashinsky Equations, in *Perspectives in Nonlinear Dynamics 2016* (Berlin, Germany, July 25-29 2016). // Stendinis pranešimas, pristatytas Vaido Juknevičiaus

B4. V. Juknevičius, Apibendrintųjų Kuramoto-Sivashinsky lygčių savybės mastelio keitimo atžvilgiu, in *41-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija: Programa ir pranešimų tezės* (Vilnius, Lithuania, 2015), p. 358. // Stendinis pranešimas, pristatytas Vaido Juknevičiaus

B5. V. Juknevičius, Long-range scaling in generalized Kuramoto-Sivashinsky equations, in *Open Readings 2015* (Vilnius, Lithuania, 2015), p. 91. // Žodinis pranešimas, pristatytas Vaido Juknevičiaus

B6. V. Juknevičius, Koreliacijos ilgais atstumais dvimačių apibendrintųjų Kuramoto-Sivashinsky lygčių generuojamuose paviršiuose, in *Penktoji jaunųjų mokslininkų konferencija "Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai"* (Vilnius, Lithuania, 2014), p. 17. // Žodinis pranešimas, pristatytas Vaido Juknevičiaus. Pranešimas atrinktas kaip vienas geriausių konferencijos pranešimų ir apdovanotas specialiu diplomu

Dar 2 disertacijos autoriaus stendiniai pranešimai kita tyrimų tema buvo pristatyti konferencijose doktorantūros studijų laikotarpiu. Vienas iš jų pristatytas disertacijos autoriaus, kitas – pranešimo benraautoriaus.

C1. V. Juknevičius, J. Ruseckas, B. Kaulakys, $1/f^{\beta}$ fluctuations from sequences of rectangular pulses, in *7th International Conference on Unsolved Problems on Noise* (Barcelona, Spain, July 13-17 2015) // Stendinis pranešimas, pristatytas bendraautorio

C2. V. Juknevičius, J. Ruseckas, B. Kaulakys, Impulsiniai procesai ir 1/f triukšmas netvarkiose medžiagose, in *41-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija: Programa ir pranešimų tezės* (Vilnius, Lithuania, 2015), p. 357. // Stendinis pranešimas, pristatytas Vaido Juknevičiaus

Asmeninis disertacijos autoriaus indėlis

Disertacijos autorius savarankiškai pasirinko darbo temą, suformulavo tyrimų kryptis, išrinko ir apžvelgė literatūrą susijusia tematika, parašė darbe naudotas skaitmeniniam modeliavimui ir duomenų analizei reikalingas programas, gavo, interpretavo bei vizualizavo disertacijoje pristatomus skaitmeninius bei analitinius rezultatus.

Visi rezultatai, pristatomi šiame darbe, išskyrus cituojamus pateiktame literatūros sąraše, yra gauti paties autoriaus.

Padėka

Visų pirma norėčiau padėkoti savo moksliniam vadovui profesoriui Bronislovui Kaulakiui, toleravusiam mano maištingą būdą ir nepaaiškinamą pasipriešinimą darbui $1/f$ triukšmų srityje.

Taip pat dėkoju profesoriui Stefan Linz (Miunsterio universitetas, Vokietija), kuris supažindino mane su netvarkių paviršių augimo tematika ir kontinuumo modeliais, nagrinėjamais šioje disertacijoje. Esu dėkingas Christian Diddens (Tventės universitetas, Olandija) už tai, kad gerokai palengvino mano pažintį su šia sudėtinga sritimi perteikdamas man savo žinias ir padėdamas išspręsti pradžioje kilusias technines problemas.

Nuoširdžią padėką reiškiu savo kolegoms ir bendraautoriams Jogundui Armaičiui ir Juliui Ruseckui už vertingas diskusijas ir efektyvų komandinį darbą rengiant publikacijas bei susirašinėjant su žurnalų redaktoriais bei recenzentais. Jiems taip pat esu dėkingas už patarimus ir konsultacijas esminiais tyrimų klausimais. Be išvardintų dalykų dar norėčiau padėkoti Jogundui ir kaip geram draugui, nešykštinčiam konstruktyvių patarimų, kompiuterio papildomiems skaičiavimams ir moralinės paramos sunkiose gyvenimo situacijose.

Noriu padėkoti ir kitiems savo kolegoms dėl daugybės priežasčių: Ryčiui Kazakevičiui – už šaunią darbo atmosferą ir nepakartojamą humorą, atpalaiduojantį įtemptai dirbantį protą, Tomui Andrijauskui – už įdomias ir įkvepiančias diskusijas apie matematiką, muziką ir kitas gyvenimo gėrybes per mūsų apsilankymus Vilniaus baruose, Viktorui Novičenko – už informatyvius bei smagius pokalbius darbo ir mokslo temomis, Aleksejui Kononovičiui – už dosnų dalinimąsi publikacijų rengimo bei disertacijos rašymo patirtimi, Aušrai Vektarienei – už draugišką paramą ir tikėjimą mano mokslo darbu bei doktorantūros studijomis, kai man pačiam to tikėjimo trūko.

Esu nepaprastai dėkingas savo geriausiam draugui Vytautui Matulevičiui už pačią įvairiausią pagalbą ir paramą, bendrą intelektualinį augimą bei už daugybę džiaugsmingų ir vertingų patirčių. Vytautui turiu dėkoti už tai, kad pastarieji daugiau nei šešiolika mano gyvenimo metų – nuo tada, kai tapome gerais draugais – buvo žymiai laimingesni ir prasmingesni nei galėjo būti, jei mudu nebūtume susitikę.

Yra daugybė kitų draugų, kurie kiekvienas savaip – tiesiogiai ar netiesiogiai – padėjo man lengviau ir smagiau gyventi akademinį gyvenimą: Remigijus Senavaitis, Martynas Pelakauskas, Robert Müller, Jonas Fuchs, Mantas Tarolis, Povilas Rastenis, Justinas Bareikis, Augustas Gaučas (Žuvis), Ieva Linkevičiūtė, Kamilė Michailovskytė, Laima Zlatkutė, Justina Jatkauskaitė ir dar daug kitų.

Ypač esu dėkingas sudėtingam Gamtos procesų ir priežastinių ryšių tinklui, kuris padėjo man sutikti Moniką...du kartus, nes nuo to laiko mes daugiau vienas nuo kito nebepasimetėme.

Galiausiai noriu padėkoti savo šeimai – tėvams ir broliui. Jiems esu dėkingas už tai, kad visada rėmė bei palaikė mane. Jie tikėjo manimi ir mano gebėjimais, kartais labiau negu aš pats pasitikėjau savimi per visus ilgus studijų metus. Tėvams taip pat dėkoju už tai, kad atvedė mane į šį pasaulį, išmokė daugybės vertingų dalykų, kad padėjo ir tebepadeda man sudėtingais gyvenimo atvejais, savo broliui – už svetingumą ir vertingus gyvenimiškus patarimus svarbiais klausimais.