

Fecha de presentación del Informe: Día Mes Año **1. Datos generales del Proyecto**

Código del proyecto: 1022			
Título del proyecto: MODELO UNIDIMENSIONAL DE CRECIMIENTO EPITAXIAL: DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE ISLAS			
Facultad o Instituto Académico: Facultad de Ciencias			
Departamento o Escuela: Departamento de Física			
Grupo (s) de investigación: Quantic			
Entidades: Universidad del Valle			
Palabras claves: Crecimiento epitaxial, sistemas reacción-difusión.			
Investigadores ¹	Nombre	Tiempo asignado	Tiempo dedicado
Investigador Principal	Diego Luis González Cabrera	10 h/s	10 h/s
Coinvestigadores			
Otros participantes	T. L. Einstein Alberto Pimpinelli Julian Andres Sanchez Muñoz Juan Felipe Giraldo Pinedo William Fernando Marín Marulanda		

2. Resumen ejecutivo:

Se estudia el efecto de la agregación obstaculizada en el proceso de formación de islas en una y dos dimensiones para un modelo de islas puntuales de crecimiento epitaxial con tamaño de núcleo crítico i . En nuestro modelo, la adhesión de monómeros a islas pre-existentes está obstaculizado por una barrera adicional, caracterizada por una

¹ Todas las personas relacionadas en el informe y que participen en el proyecto deben haber suscrito el acta de propiedad intelectual de acuerdo con los formatos establecidos.



longitud l_a . Para $l_a=0$ las islas se comportan como sumideros perfectos mientras que para $l_a \rightarrow \infty$ se comportan como fronteras reflectivas. Para valores intermedios de l_a , el sistema exhibe un cambio entre dos tipos diferentes de procesos: agregación limitada por difusión (DLA) y agregación limitada por reacción (ALA). Las distribuciones de zonas de captura (CZ) y de tamaño de islas (IS) son calculadas para diferentes valores de i y l_a . Con el fin de obtener una buena descripción del proceso de nucleación, se propone un modelo de fragmentación basado en una descripción aproximada de la nucleación dentro de los espaciamentos en 1D y de las zonas de captura en 2D. En ambos casos, la nucleación es descrita usando dos probabilidades con fundamento físico cada una de las cuales está relacionada con los parámetros microscópicos del modelo (i y l_a). Probamos nuestro modelo analítico con extensas simulaciones numéricas y con resultados establecidos previamente. El modelo propuesto describe excelentemente el comportamiento estadístico del sistema para valores arbitrarios de l_a e $i = 1, 2$ y 3 ; esto nos permite usar el modelo para determinar el valor de la barrera a partir de resultados experimentales.

Abstract

We study the effect of hindered aggregation on the island formation process in a one and two-dimensional point-island model for epitaxial growth with arbitrary critical nucleus size i . In our model, the attachment of monomers to pre-existing islands is hindered by an additional attachment barrier, characterized by length l_a . For $l_a = 0$ the islands behave as perfect sinks while for $l_a \rightarrow \infty$ they behave as reflecting boundaries. For intermediate values of l_a the system exhibits a crossover between two different kinds of processes, diffusion-limited aggregation (DLA) and attachment-limited aggregation (ALA). The capture-zone (CZ) and the island size (IS) distributions are calculated for different values of i and l_a . In order to obtain a good spatial description of the nucleation process, we propose a fragmentation model which is based on an approximate description of nucleation inside of the gaps for 1D and the CZ's for 2D. In both cases, the nucleation is described by using two different physically rooted probabilities which are related with the microscopic parameters of the model (i and l_a). We test our analytical model with extensive numerical simulations and previously established results. The proposed model describes excellently the statistical behavior of the system for arbitrary values of l_a and $i = 1, 2$ and 3 ; this allows us to use the model for the determination of the attachment barrier from experimental results.

3. Síntesis del proyecto:

En el presente proyecto nos trazamos como objetivo estudiar el efecto de una barrera adicional que obstaculizara la agregación de monómeros a islas previamente formadas.



Por medio de simulaciones computacionales y de modelos analíticos se encontró el efecto de dicha barrera en dos cantidades que son usualmente medidas en los experimentos: la distribución de zonas de captura y la distribución de tamaño de islas. El modelo propuesto describe excelentemente el comportamiento estadístico del sistema lo que nos permite usarlo para determinar el valor de la barrera a partir de resultados experimentales, ver anexos.

La validez y alcance del modelo propuesto está siendo investigada en la actualidad por el profesor Ted Einstein de la Universidad de Maryland, quien además es coautor de uno de los artículos que contiene resultados de este estudio y que será sometido próximamente.

Los resultados del proyecto fueron socializados en eventos nacionales e internacionales. Tres estudiantes de pregrado hicieron parte del proyecto lo que les permitió familiarizarse con el proceso investigativo. Además, gracias a su participación se iniciaron en técnicas de simulación como las de Monte Carlo cinético y dinámica molecular.

Tema:

Crecimiento epitaxial.

Objetivos:

Usar herramientas teóricas de mecánica estadística para describir la evolución temporal de la distribución de tamaño de islas durante el crecimiento epitaxial de superficies para diferentes valores de β y de la barrera λ .

Metodología:

Para el estudio del sistema propuesto se usaron simulaciones de Monte Carlo cinético, acompañadas de modelos de reacción difusión que permiten escribir un conjunto de ecuaciones auto consistentes. Este modelo analítico se probó para diferentes valores de β y de la barrera de agregación.

Resultados obtenidos

2. Se estudio la evolución temporal de la distribución de tamaño de islas para diferentes valores de la barrera λ con tamaños de núcleo crítico $\beta=1$, $\beta=2$ e $\beta=3$. Los resultados analíticos fueron respaldados por simulaciones computacionales.
3. Se encontró que la barrera tiene un efecto importante sobre la ISD y CZD en el régimen de agregación pero no juega un papel determinante en el régimen de baja cobertura.



4. Se encontró que la aproximación de campo medio funciona bien en el límite de barreras débiles pero da pobres resultados para barreras fuertes.

Principales conclusiones y/o recomendaciones:

Dado que la forma funcional de la ISD depende fuertemente de la barrera la se abre una puerta para la determinación experimental de la barrera a partir de las expresiones analíticas y de los resultados obtenidos en esta investigación.

4. Impactos actual o potencial:

Académico (aportes a la docencia, aportes a la formación de recursos humanos).

Uno de los mayores impactos del presente proyecto se observa en la formación de recurso humano. Fueron 2 los estudiantes involucrados como monitores en el desarrollo del proyecto. Los estudiantes se familiarizaron con el método de Monte Carlo Cinético para la simulación de sistemas de muchas partículas.

Investigativo (divulgación de resultados).

Los investigadores y estudiantes involucrados en el en el proyecto presentamos seminarios de grupo en varias ocasiones en los grupos del Departamento de Física: Grupo de Física Teórica del Estado Sólido.

Eventos Científicos Nacionales:

1. Simulación de un sistema colidal bidimensional como modelo de crecimiento epitaxial. XXI Congreso Nacional de Física, Manizales, 29 de Septiembre de 2015.
2. Seminario de Física Teórica 2015-I y 2015-II.

Eventos Científicos Internacionales:

1. "Island Size Distribution with Hindered Aggregation in 1D". Diego Luis Gonz'alez, Julián Andres Sanchez y Manuel Camargo, STATPHYS26 18-22 Julio 2016 Lyon (Francia).
2. Progress in Application of Generalized Wigner Distribution to Growth and Other Problems. APS March Meeting, Marzo 14 a 18, Baltimore, Maryland 2016.



3. Brownian simulation of a colloid system as a model for epitaxial growth, XXII SLAFES de Nov. 30 a Dic. 4, Puerto Varas, Chile 2015.

Desarrollos futuros - Proyecto presentado a convocatoria externa.

El proyecto titulado. "Modelos de crecimiento de islas y escalones interactuantes: Aspectos clásicos y cuánticos", fué presentado a una convocatoria externa (Colciencias), en este momento el proyecto está en curso con CI 1034.

5. Productos:

Tabla No. 1. Cantidad y tipo de productos pactados en el *Acta de Trabajo y Compromiso* y productos finalmente presentados

TIPO DE PRODUCTOS	No. de PRODUCTOS PACTADOS				No. de PRODUCTOS PRESENTADOS			
	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
Productos de nuevos conocimientos								
Artículo en revista ISI-SCOPUS:								
Artículo completo publicado en revistas indexadas	A1	A2	B	C	A1	A2	B	C
	1		1		2			
Libros de autor que publiquen resultados de investigación								
Capítulos en libros que publican resultados de investigación								
Productos o procesos tecnológicos patentados o registrados								
• Prototipos y patentes								
• Software								
Productos o procesos tecnológicos usualmente no patentables o protegidos por secreto industrial								

Elaborado por: Vicerrectoría de Investigaciones



TIPO DE PRODUCTOS	No. de PRODUCTOS PACTADOS		No. de PRODUCTOS PRESENTADOS	
	No. de estudiantes vinculados	No. de tesis	No. De estudiantes Vinculados	No. De tesis
Normas basadas en resultados de investigación				
Formación de recursos humanos				
Estudiantes de pregrado	1		3	
Semillero de Investigación				
Estudiantes de maestría				
Estudiantes de doctorado				
Joven investigador				
Productos de divulgación				
Publicaciones en revistas no indexadas				
Ponencias presentadas en eventos (congresos, seminarios, coloquios, foros)	No. de ponencias nacionales	No. de ponencias internacionales	No. de ponencias nacionales	No. de ponencias internacionales
Propuesta de investigación	1	1	1	3
Propuestas presentadas en convocatorias externas para búsqueda de financiación.		1		1

Tabla No. 2. Detalle de productos

Para cada uno de los productos obtenidos y relacionados en la tabla anterior, indique la información solicitada para cada uno, anexando copia de las respectivas constancias. Como anexo a este formato encontrará el instructivo para instructivo para la revisión de informes finales y productos

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	Journal of Physics: Conference Series 640 (2015) 012024
Nombre	Progress in characterizing submonolayer island growth:



Particular:	Capture-zone distributions, growth exponents, & hot precursors
Ciudad y fechas:	Inglaterra, 28 de septiembre de 2015
Participantes:	Theodore L. Einstein, Alberto Pimpinelli, Diego Luis González y Josue R. Morales-Cifuentes.
Sitio de información:	Journal of Physics: Conference Series http://iopscience.iop.org/issue/1742-6596/640/1
Formas organizativas:	Grupo de Física Teórica del Estado Sólido, Departamento de Física, Universidad del Valle.

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	J. Phys. A: Math. Theor. 50 (2017) 035001 (15pp)
Nombre Particular:	Island nucleation inside a one-dimensional gap with hindered aggregation
Ciudad y fechas:	Inglaterra, 9 de diciembre de 2016
Participantes:	Diego Luis González
Sitio de información:	Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/50/3/035001/meta
Formas organizativas:	Grupo de Física Teórica del Estado Sólido, Departamento de Física, Universidad del Valle.

La presente versión del informe contiene las observaciones de los evaluadores:

Firma del investigador principal

VoBo. Vicedecano de Investigaciones

Por favor presente su informe impreso y en formato digital en hoja tamaño carta, letra arial 11, con espacios de 1 1/2