

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

Código del proyecto: 1072			
Título del proyecto: Sistemas clásicos de espines fuera del equilibrio y crecimiento epitaxial coloidal: un enfoque numérico a través de los métodos de Monte Carlo cinético y Metrópolis			
Facultad o Instituto Académico: CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS			
Departamento o Escuela: FÍSICA			
Grupo (s) de investigación: GRUPO DE FÍSICA TEÓRICA DEL ESTADO SÓLIDO			
Entidades:			
Palabras claves:			
Investigadores ¹	Nombre	Tiempo asignado	Tiempo dedicado
Investigador Principal	Juan Carlos Granada E.	5 h/s	5 h/s
Coinvestigadores	Diego Luis Gonzalez Cabrera	10 h/s	10 h/s
	Karem Cecilia Rodríguez	5 h/s	5 h/s
Otros participantes	Julián Andrés Sánchez Muñoz	20 h/s	20 h/s
	Santiago Figueroa Manrique	20 h/s	20 h/s
	Nadía Rivera Torres	20 h/s	20 h/s
	Sadan García Negrete	40 h/s	40 h/s

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.

2. Resumen ejecutivo:

Con base en el método Monte Carlo, se implementaron algoritmos versátiles para dilucidar propiedades magnéticas y de dinámica molecular de sistemas de baja dimensionalidad. Se describió la evolución y la deposición de partículas coloidales dentro de una suspensión bajo un campo externo, así como su difusión lateral y el proceso de formación de islas. Se implementaron simulaciones con muestreo aleatorio para el estudio de propiedades estadísticas de sistemas magnéticos tipo Ising, prestando especial atención al problema de la percolación, el procedimiento de inversión de espín y el cálculo de la diferencia de energías entre configuraciones con el fin de examinar la coercitividad y la remanencia de imanes permanentes en la presencia de campos magnéticos externos. También se implementaron algoritmos numéricos para sistemas de baja dimensionalidad de pocos y muchos cuerpos, con el fin de estudiar la dinámica de Moléculas diatómicas polares en presencia de un campo eléctrico constante y uniforme, considerando un ensamble de moléculas polares en una red óptica 2D en el régimen de aislante de Mott, con una molécula por sitio y prestando especial atención a la intensidad del parámetro experimental que caracteriza la trampa e incluyendo un campo eléctrico perpendicular al arreglo 1D. Se hallaron las condiciones de acople de los estados rotacionales en el límite de campo débil los estados y se estudió el efecto del campo sobre los estados rotacionales “vestidos” y se determinó el corrimiento necesario para obtener la energía de excitación por sitio, ilustrando los resultados para varias moléculas alcalinas.

En la ejecución de este proyecto, se vincularon 3 estudiantes de pregrado y 1 estudiante de doctorado. Los resultados obtenidos se reportaron en tres ponencias en evento nacional y una ponencia en evento internacional. Los resultados quedaron plasmados en dos publicaciones internacionales en revista de alto impacto (clasificada por COLCIENCIAS en la categoría A1) y en una publicación nacional..

Abstract.

On the basis of Monte Carlo method, versatile algorithms were implemented in order to elucidate the magnetic properties and the molecular dynamics of low dimensional systems. The evolution and the deposition of colloidal particles were described as well as the process of island formation. Simulations with random sampling were implemented for the study of statistical properties of Ising type magnetic systems, with emphasis on percolation, spin inversion and energy differences between configurations, to understand the coercivity and remanent magnetization of permanent magnets in external magnetic fields. Numerical algorithms were also implemented for many particle and few particle low dimensional systems, paying special attention to the dynamics (in the Mott insulator regime) of polar diatomic molecules in a one dimensional optic lattice with a molecule per site in the presence of an external constant and homogeneous electric field. The conditions for the coupling of rotational states in the low field limit were found and the effect on the field-dressed rotational rotational splitting necessary to obtain the on-site excitation energy.

Three graduate students and one Ph.D student took part in this project. The obtained results were reported in three presentations in a national congress and in one presentation in an international conference. The results are included in two international publications in a journal with high impact factor and in a local journal.

3. Síntesis del proyecto:

El proyecto tuvo como hilo conductor el uso del método Monte Carlo para dilucidar propiedades magnéticas y de dinámica molecular de sistemas de baja dimensionalidad, con especial énfasis en las propiedades dinámicas y estacionarias de sistemas bidimensionales de muchas partículas. Para ello se plantearon como objetivos específicos implementar algoritmos versátiles de Monte Carlo Cinético y Metrópolis con el muestreo de Wang-Landau, para estudiar tanto propiedades en equilibrio como dinámica fuera del equilibrio en una gran diversidad de sistemas físicos, entre los que destacan sistemas de crecimiento epitaxial coloidal bidimensional sobre un sustrato unidimensional. Así mismo, se planteó usar estas herramientas para analizar la coercitividad y remanencia de un sistema bidimensional magnetizable de manera permanente en presencia de un campo magnético externo.

Para el desarrollo de estos objetivos se determinaron numéricamente tasas de transición a partir de simulaciones extensivas de dinámica molecular, con ayuda de las cuales se simuló la evolución de un sistema sólido sobre sólido, extendiendo las simulaciones a tamaños y tiempos que son imposibles de obtener por medio de dinámica molecular. La Implementación y el análisis percolativo desarrollado con estos instrumentos permitieron determinar y caracterizar dominios magnéticos en sistemas bidimensionales con propiedades magnéticas, prestando especial atención a la fase ferromagnética y al tamaño de los dominios en presencia de un campo magnético externo.

Siguiendo la anterior metodología, se obtuvieron los siguientes resultados:

Con el estudiante de pregrado Julián A. Sánchez bajo la orientación del Prof. Diego Luis González se desarrollaron algunos aspectos generales de la Ecuación de Fokker-Planck (EFP) en especial su conexión con las ecuaciones de Langevin. El formalismo dado por la EFP se usó en el estudio de la deposición de partículas sobre un sustrato lineal en presencia de una suspensión coloidal bidimensional diluida. Con base en algoritmos basados en la dinámica de Langevin se estudió la evolución de las partículas coloidales dentro de la suspensión y se caracterizó su lenta deposición sobre el sustrato debido a la acción de un campo externo. Una vez depositadas, se describió cómo las partículas pueden difundirse lateralmente sobre el sustrato. En particular, se calcularon la tasa de deposición promedio sobre el sustrato y la constante de difusión lateral de las partículas sobre el sustrato. Debido a la acción del campo las partículas lentamente se depositan sobre un sustrato. Una vez depositadas las partículas se difunden formando estructuras llamadas islas. Usando ecuaciones de Langevin y Fokker-Planck se estudiaron las propiedades difusivas de las partículas en la suspensión y sobre el sustrato. Los resultados analíticos se compararon con los obtenidos por medio de simulaciones de dinámica molecular (DM). También se propuso un procedimiento basado en los resultados previos para usar el método en Monte Carlo cinético en el estudio de este sistema. Estos resultados se reportaron en las siguientes publicaciones internacionales:

Diego Luis González, Alberto Pimpinelli and T. L. Einstein, Fragmentation approach to the point-island model with hindered aggregation: Accessing the barrier energy,

PHYSICAL REVIEW E 96, 012804 (2017) (Anexo-01)

Diego Luis González, Manuel Camargo and Julián A. Sánchez¹, Island size distribution with hindered aggregation, PHYSICAL REVIEW E 96, 012804 (2017) (Anexo-02)

y en la publicación nacional

Diego Luis González, Manuel Camargo Chaparro y Julián Andrés Sánchez Muñoz, Diffusion and Deposition Rates in a Colloidal Model for Epitaxial Growth, Revista de Ciencias. **21** No. 1, 23 (2017) (Anexo 03)

Los resultados de este trabajo se reportaron en dos ponencias en el evento nacional XXVII CONGRESO NACIONAL DE FÍSICA llevado a cabo en la Ciudad de Cartagena los días 3, 4, 5, 6 de Octubre de 2017. (Anexos 04, 05). Adicionalmente, el estudiante Julián A. Sánchez presentó su proyecto de trabajo de grado, el cual fue aprobado con base en la evaluación positiva del mismo (Anexo 06).

- Con los estudiantes de pregrado Santiago Figueroa Manrique y Nadia Rivera-Torres bajo la orientación de la Prof. Karen Rodríguez se implementaron simulaciones con muestreo aleatorio para el estudio de las propiedades estadísticas de sistemas magnéticos tipo Ising. El estudio se realizó mediante el algoritmo de Metrópolis para la determinación de los estados de equilibrio; en particular, se mostró cómo es la implementación del método incluyendo el muestreo de Monte Carlo para el problema de la percolación, el procedimiento de inversión de espín y el cálculo de la diferencia de energías entre configuraciones. De esta manera se desarrolló un algoritmo completo capaz de calcular observables físicos locales. Este ejercicio académico permitió incluir el muestreo de Wang-Landau para estudiar la coercitividad y la remanencia de imanes permanentes en la presencia de campos magnéticos externos. Los resultados de este trabajo se reportaron en el evento nacional XXVII CONGRESO NACIONAL DE FÍSICA llevado a cabo en la Ciudad de Cartagena los días 3, 4, 5, 6 de Octubre de 2017. (Anexo 07).
- El estudiante de doctorado Sadan García Negrete, bajo la orientación de la Prof. Karen Rodríguez, implementó algoritmos numéricos para sistemas de baja dimensionalidad de pocos y muchos cuerpos, con el fin de estudiar la dinámica de Moléculas diatómicas polares en presencia de un campo eléctrico constante y uniforme. En particular, se consideró un ensamble de moléculas polares en una red óptica 2D en el régimen de aislante de Mott, con una molécula por sitio, prestando especial atención a la intensidad del parámetro experimental que caracteriza la trampa e incluyendo un campo eléctrico perpendicular al arreglo 1D. Se demostró que en límite de campo débil los estados rotacionales con $m=0$ se acoplan entre sí, preservando la regla de selección $\Delta N \pm 1$. Se estudió el efecto del campo sobre los estados rotacionales “vestidos” y se determinó el corrimiento necesario para obtener la energía de excitación por sitio, ilustrando los resultados para varias moléculas alcalinas. Estos resultados fueron reportados en el evento internacional XXIII Latin American Symposium on Solid State Physics-Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido XXIII, Bariloche, 10 - 13 April 2018 (Anexo 08)

- En el marco de la convocatoria de Colciencias “*ecosistema científico para la conformación de un banco de programas de i+d+i elegibles que contribuyan al mejoramiento de la calidad de las instituciones de educación superior colombianas-2017*” el Grupo de Física Teórica del Estado Sólido formó parte del “*Programa de investigación, innovación y desarrollo en energías sostenibles para un desarrollo multiregional en Colombia (PIDESCO)*” (Anexo 09) presentando el proyecto R1-24 “*Nanoestructuras de materiales fuertemente correlacionados de baja dimensionalidad para la captura y/o transporte energía*” (Anexo 10), con Código de Registro 58605. Lamentablemente dicha propuesta no fue elegida. Actualmente, el Grupo de Física Teórica del Estado Sólido está en la búsqueda de nuevas convocatorias.

Además de aportar al conocimiento de frontera, el aporte transversal más importante del presente proyecto ha sido la formación de estudiantes de pregrado y doctorado en la implementación de diversos algoritmos Monte Carlo versátiles para ser utilizados en una gran diversidad de sistemas físicos, tanto en equilibrio como fuera de éste, de gran interés para el desarrollo industrial nacional e internacional.

4. Impactos actual o potencial:

El presente proyecto ha contribuido a la formación de los siguientes tres estudiantes de pregrado, vinculados al programa de semilleros:

Julián Andrés Sánchez Muñoz
Santiago Figueroa Manrique
Nadia Rivera-Torres

El nivel de formación se evidencia en la participación de estos estudiantes como ponentes en un evento científico nacional y en la participación de uno de ellos como coautor en una publicación internacional y una nacional.

Cabe señalar que estos estudiantes actualmente cursan los créditos del programa académico de Física correspondientes al octavo y noveno semestre. Por este motivo, en el presente proyecto no es posible reportar trabajos de grado culminados, aunque los resultados obtenidos por los estudiantes de pregrado son más que suficientes para conformar sus documentos de Trabajo de Grado final.

El presente proyecto ha contribuido también a la formación del estudiante de doctorado Sadan García Negrete, quien actualmente cursa el tercer semestre de su doctorantura.

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	
Productos de nuevos conocimientos				
Artículo aceptado para evaluación en una revista Q2.	2		2 publicados en revista Q1 (Anexo-01), (Anexo-02) 1 publicado en revista C. (Anexo-03)	
Formación de recursos humanos	No. de estudiantes vinculados	No. de tesis	No. De estudiantes Vinculados	No. De tesis
Estudiantes de pregrado	2	1		
Semillero de Investigación	1	1	3	0 (*)
Estudiante de doctorado vinculado	1		1	

(*) En los compromisos de la propuesta inicial se estipula la vinculación de 1 estudiante de pregrado al programa de semilleros y la vinculación de dos estudiantes de pregrado adicionales para la realización y culminación de su trabajo de grado. Sin embargo, debido al escaso número de estudiantes de pregrado en los semestres finales, al proyecto se vincularon 3 estudiantes de semestres intermedios que podían formar parte del programa de semilleros de investigación. Como se indica en la sección 4 de este informe, estos estudiantes actualmente cursan los créditos del programa académico de Física correspondientes al octavo y noveno semestre. Por este motivo, en el presente proyecto no es posible reportar trabajos de grado culminados, aunque los resultados obtenidos por los estudiantes de pregrado son más que suficientes para conformar sus documentos de Trabajo de Grado final.

TIPO DE PRODUCTOS	No. de PRODUCTOS PACTADOS		No. de PRODUCTOS PRESENTADOS	
Productos de divulgación				
Ponencias presentadas en eventos (congresos, seminarios, coloquios, foros)	No. de ponencias nacionales	No. de ponencias internacionales	No. de ponencias nacionales	No. de ponencias internacionales
	1	1	3 (Anexo-04), (Anexo-05), (Anexo-07).	1 (Anexo-08),
Propuesta de investigación				
Propuestas presentadas en convocatorias externas para búsqueda de financiación.	1		1 (Anexo-09).	

Tabla No. 2. Detalle de productos

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	PHYSICAL REVIEW E 96 , 012804 (2017)
Nombre Particular:	Fragmentation approach to the point-island model with hindered aggregation: Accessing the barrier energy
Ciudad y fechas:	Ciudad y fecha de publicación o presentación del resultado.
Participantes:	Diego Luis González, Alberto Pimpinelli and T. L. Einstein.
Sitio de información:	DOI: 10.1103/PhysRevE.96.012804.
Formas organizativas:	GRUPO DE FÍSICA TEÓRICA DEL ESTADO SÓLIDO

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	Revista de Ciencias. 21 No. 1, 23 (2017)
Nombre Particular:	The Use of Entanglement Entropy to Classify Quantum Phase Transitions in 1D Ultracold Spinor Bosons
Ciudad y fechas:	Ciudad y fecha de publicación o presentación del resultado.
Participantes:	Karen Rodríguez Ramírez.
Sitio de información:	Biblioteca Central.
Formas organizativas:	GRUPO DE FÍSICA TEÓRICA DEL ESTADO SÓLIDO



Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	Revista de Ciencias. 21 No. 1, 23 (2017)
Nombre Particular:	Diffusion and Deposition Rates in a Colloidal Model for Epitaxial Growth,
Ciudad y fechas:	Ciudad y fecha de publicación o presentación del resultado.
Participantes:	Diego Luis González, Manuel Camargo Chaparro y Julián Andrés Sánchez Muñoz.
Sitio de información:	Biblioteca Central,
Formas organizativas:	GRUPO DE FÍSICA TEÓRICA DEL ESTADO SÓLIDO

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