

Fecha de presentación del Informe: Día Mes Año

Datos generales del Proyecto

Código del proyecto: 7918			
Título del proyecto: Escalones Interactuantes y Formación de Islas Durante el Crecimiento Epitaxial 2			
Facultad o Instituto Académico: Facultad de Ciencias			
Departamento o Escuela: Departamento de Física			
Grupo (s) de investigación: Quantic			
Investigadores ¹	Nombre	Tiempo asignado	Tiempo dedicado
Investigador Principal	Diego Luis González Cabrera	15 h/s	15 h/s
Coinvestigadores			
Otros participantes	T. L. Einstein Alberto Pimpinelli		

1. Resumen ejecutivo:

Resumen

Los procesos de crecimiento manifiestan una serie de fenómenos fuera del equilibrio los cuales han sido objeto de muchos estudios durante los últimos años. Sin embargo, la importancia de los procesos de crecimiento van más allá del contexto académico. Por ejemplo, el conocimiento de los procesos atomísticos envueltos en el crecimiento de películas en el régimen submonocapa es crucial en la producción de dispositivos nano electrónicos. Usualmente, las reacción y la difusión son los dos procesos claves en el

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.

crecimiento epitaxial. Dependiendo de cual de los dos el proceso que limita la evolución temporal, es posible encontrar dos regímenes diferentes: agregación limitada por difusión (DLA) o agregación limitada por reacción (RLA).

La mayoría de cálculos en teoría de nucleación están basados en el régimen DLA. Sin embargo, hay evidencia experimental de la existencia del régimen DLA en procesos de crecimiento. Un ejemplo está dado por moléculas orgánicas de hexaphenyl (6P) sobre mica. Se ha mostrado que, bajo ciertas condiciones la nucleación en este sistema está descrita por RLA. Otro ejemplo está dado por la nucleación y el crecimiento de islas bidimensionales de Ge sobre una superficie de Si(111) cubierta de una capa de Pb. También han sido reportados los regímenes DLA y RLA en varios sistemas coloidales.

Hay muchos mecanismos físicos que pueden generar un cambio de DLA a RLA, por ejemplo, agregación obstaculizada y evaporación. Este proyecto está dedicado al estudio del impacto de la agregación obstaculizada por una barrera ES sobre las distribuciones de tamaño de espaciamentos $\rho^{(0)}(s)$ y de zonas de captura $P(s)$ para diferentes valores de núcleo crítico s_i .

Se encontró que la barrera ES cambia los exponentes de crecimiento y las formas funcionales de $\rho^{(0)}(s)$ y $P(s)$. Para valores pequeños de la barrera la mayoría de eventos de nucleación ocurren cerca del centro del espaciamento, pero para barreras grandes los eventos de nucleación están distribuidos más homogéneamente a lo largo del espaciamento.

Hay diferentes escalas de tiempo envueltas en el proceso de formación de islas. Para barreras débiles, la agregación es limitada por difusión. Para barreras fuertes la agregación es limitada por reacción. Debido a esto, al menos dos diferentes regímenes se necesitan para describir apropiadamente la estructura generada por las islas puntuales, un régimen para espaciamentos grandes y otro para espaciamentos pequeños.

Una buena aproximación para el perfil promedio de nucleación $\rho^{(\lambda)}(\lambda)$ y para la rata de nucleación $\omega(y)$ permite una descripción apropiada del proceso de nucleación. Para valores arbitrarios de l_{es} e $i=1, 2, \text{ y } 3$, $\rho^{(\lambda)}(\lambda)$ puede aproximarse por un polinomio de orden $2(i+1)$.

El modelo fenomenológico presentado es general y simple pero retiene las propiedades físicas más relevantes del sistema. Finalmente, se encontró que para valores generales de s_i y l_{es} , la estructura generada por las islas puntuales puede describirse por medio de las cantidades $P_N(x,y)$ y $\omega(y)$.

Abstract

Growth processes provide interesting out of equilibrium phenomena which have been the subject of several studies in recent years. However, the importance of growth processes goes beyond of the academic context. For example, the understanding of the atomistic processes involved in submonolayer film growth is crucial in the production of nano and microelectronic devices. Usually, reaction and diffusion are the two key atomistic processes in epitaxial growth. Depending on which one is the rate-limiting process, one finds two different regimes: diffusion limited aggregation (DLA) and reaction limited aggregation (RLA). Most calculations on theory of nucleation are based on the DLA regime. However, there are experimental evidence about the existence of the RLA regime in growth processes. One example is given by rod-like organic molecules hexaphenyl (6P) on sputter-modified mica. It has been shown, that, under some conditions the nucleation in this system is described by RLA. Another example is given by the nucleation and growth of two-dimensional (2D) Ge islands at a Pb layer covered Si(111) surface, both DLA and RLA have been also reported in several colloidal systems.

There are several physical mechanism which can generate a crossover from DLA to RLA, for example, hindered aggregation and evaporation. This research project was devoted to the study of the impact of an ES barrier on the gap size distribution $\rho^{(0)}(s)$ and capture zone distribution $P(s)$ for different values of i .

We found that, the ES barrier changes the growth exponents and the functional forms of $\rho^{(0)}(s)$ and $P(s)$. For small values of I_{es} , most of the nucleation events occur near the middle of the gap, but for large values of I_{es} the nucleation events are more homogeneously distributed along the gap.

There are several different time scales involved in the island formation process. For weak barriers the aggregation is diffusion limited. For strong barriers the aggregation is reaction limited. Hence, at least two different regimes are generally required to describe properly the structure of the point islands, one of them for large gaps and another one for small gaps.

A good approximation for the average nucleation profile $\rho^{(\lambda)}(\lambda)$ and $\omega(y)$ allows one to describe properly the nucleation process. For arbitrary values of I_{es} and $i=1$,

2, and 3, $p_n^{\lambda}(\lambda)$ can be approximated by a polynomial of order $2(i+1)$.

Both, the MF and CP approaches give important information about the nucleation process. However, the MF describes well $p_n^{\lambda}(\lambda)$ for small values of I_{es} but in general overestimates the value of γ . The CP approach provides a better approximation for both $p_n^{\lambda}(\lambda)$ and γ , but it also overestimates the value of γ mainly because of the assumption that when the $(i+1)^{th}$ monomer arrives, the density of monomers have achieved its stationary state.

The phenomenological model presented is quite general and simple but retains the most relevant physical properties of the system. Finally we find that for general values of i and I_{es} the structure generated by the point islands can be described in terms of $P_N(x,y)$ and $\omega(y)$.

2. Síntesis del proyecto:

Tema:

Crecimiento epitaxial.

Objetivos:

Usar herramientas teóricas de mecánica estadística para describir algunos resultados experimentales encontrados durante el crecimiento epitaxial de superficies. En particular nos centraremos en la distribución de espaciamientos entre islas en el caso $i > 1$ y barreras ES diferentes de cero.

Metodología:

Para el estudio del sistema propuesto se usaron simulaciones de Monte Carlo cinético, acompañadas de modelos de reacción difusión y de una ecuación de fragmentación para la distribución $\rho^{(0)}(s)$. Se estudio la forma funcional de los kernel de captura para diferentes tamaños de núcleo crítico y valores de la barrera ES arbitrarios para encontrar expresiones analíticas para la evolución temporal de las densidades de islas y de monómeros. Las distribuciones de tamaño de los espaciamientos y de las zonas de captura se obtuvieron analíticamente por medio de una expresión aproximada para la probabilidad de nucleación dentro de un espaciamiento.

Resultados obtenidos

- Se estudio la evolución temporal de la densidad de islas y de monómeros para diferentes valores de la barrera ES con tamaños de núcleo crítico $i=1$, $i=2$ e $i=3$. Los resultados analíticos fueron respaldados por simulaciones computacionales. Se encontró que la barrera ES tiene un efecto importante sobre las densidades mencionadas en el régimen de agregación pero no juega un papel determinante en el régimen de baja cobertura.
- Los resultados anteriores permitieron la determinación de los exponentes de crecimiento de las densidades en los regímenes de agregación y de baja cobertura.
- Usando una ecuación de fragmentación unidimensional se estudio analíticamente el efecto de la barrera ES sobre las distribuciones de tamaños de espaciamientos y de zonas de captura. Se encontró que la barrera ES cambia el perfil de la densidad de monómeros y de la probabilidad de nucleación dentro de un espaciamiento lo que implica que la barrera ES determina en gran medida la forma de estas distribuciones.
- 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 tanto los exponentes de crecimiento como las distribuciones de espaciamientos y de zonas de captura dependen fuertemente de la barrera ES 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.

3. 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 completo publicado en revistas A1 o A2	1	1
Artículo completo publicados en revistas B	1	1
Artículo completo publicados en revistas C		
Libros de autor que publiquen resultados de investigación		
Capítulos en libros que publiquen 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		
Normas basadas en resultados de investigación		

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
Formación de recursos humanos				
Estudiantes de pregrado	2	2	1	1
Semillero de Investigación				
Estudiantes de maestría				
Estudiantes de doctorado				
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
	1	1	3	2
Propuesta de investigación				
Propuestas presentadas en convocatorias externas para búsqueda de financiación.	1		1	

Tabla No. 2. Detalle de productos.

Tipo de producto:	Artículo		
Nombre General:	Crystal Growth 401, 67–71		
Nombre Particular:	Analyzing Capture Zone Distributions (CZD) in Growth: Theory and Applications		
Ciudad y fechas:	North-Holland	2014	

Participantes:	T. L. Einstein, Alberto Pimpinelli y Diego Luis González
Sitio de información:	http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022024814000839
Formas organizativas:	Quantic

Tipo de producto:	Artículo (Sometido)
Nombre General:	Revista de Ciencias
Nombre Particular:	Modelo unidimensional de islas puntuales con agregación obstaculizada: Un enfoque cinético
Ciudad y fechas:	Cali 2014
Participantes:	Diego Luis González
Sitio de información:	http://revistaciencias.univalle.edu.co/
Formas organizativas:	Quantic

Tipo de producto:	Trabajo de Grado
Nombre General:	Revista de Ciencias
Nombre Particular:	Ensamblajes Circulares de Matrices Aleatorias y Sistemas de Partículas Interactuantes Clásicos y Cuánticos en Equilibrio.
Ciudad y fechas:	En curso
Participantes:	Alejandro Otero
Sitio de información:	Biblioteca Univalle

Formas
organizativas:

Quantic

NOTA: En este momento hay otro artículo en preparación titulado "Fragmentation approach to the one-dimensional point-island model with hindered aggregation". Este artículo también se está desarrollando junto con T. L Einstein y Alberto Pimpinelli y será sometido en los próximos meses al Physical Review B.

4. Impactos actual o potencial:

Durante el desarrollo de este proyecto se obtuvieron expresiones analíticas para los exponentes dinámicos de las densidades de monómeros y de islas. Además se obtuvo una excelente aproximación para las distribuciones de zonas de captura y de tamaño de espaciamiento. Estos resultados abren la puerta para una determinación de las barreras ES a partir de resultados experimentales.

Por otra parte, los resultados obtenidos fueron presentados en tres eventos nacionales y uno internacional. Esto permitió divulgar los resultados a la comunidad científica y aumentar la visibilidad de la Universidad del Valle a nivel nacional e internacional. Los eventos en donde fueron presentados los resultados del proyecto se muestran a continuación.

- T. L. Einstein, Alberto Pimpinelli y Diego Luis González, Further Developments in Characterizing Capture Zone Distributions (CZD) in Island Growth. APS March Meeting. Marzo 2014 Denver, Estados Unidos de América.
- T. L. Einstein, Alberto Pimpinelli y Diego Luis González, Analyzing Capture Zone Distributions (CZD) in Growth: Theory and Applications. 17th International Conference on Crystal Growth and Epitaxy ICCGE-17. Agosto 2013 Warsaw, Polonia.
- Diego Luis González, Formación de Islas con Agregación Obstaculizada en una Dimensión. XXV Congreso Nacional de Física, 2013. Armenia, Colombia.
- Diego Luis González, On the partial relation between random matrices and some non-equilibrium systems. Escuela de Física Matemática, 2014. Bogotá, Colombia.
- Diego Luis González, Island nucleation inside a one-dimensional Gap with hindered aggregation. 2nd Workshop on Statistical Mechanics, 2014. Bogotá, Colombia.

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