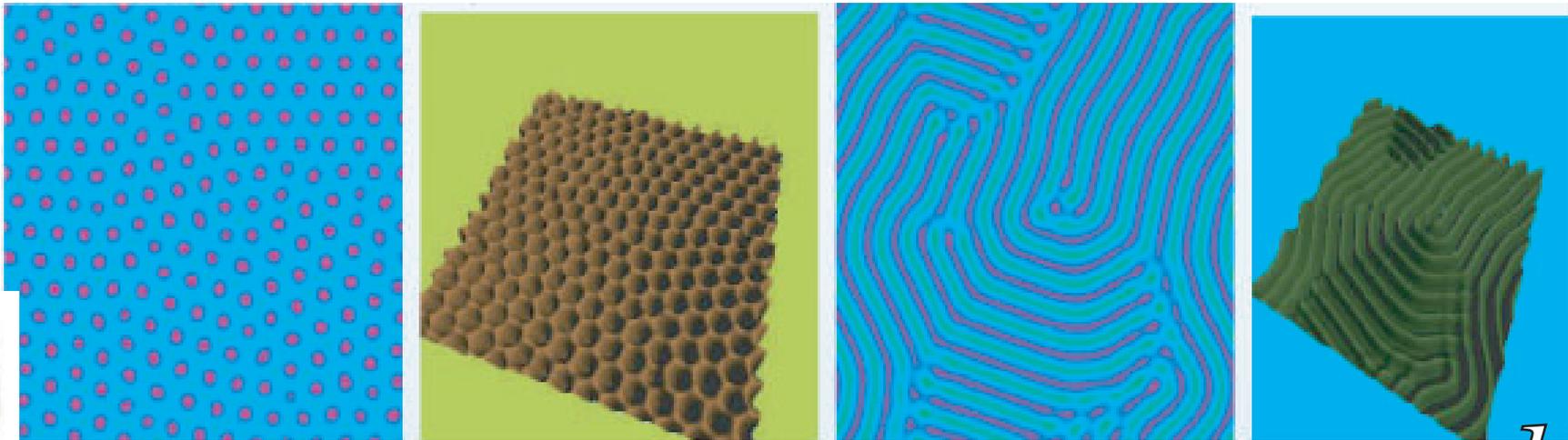


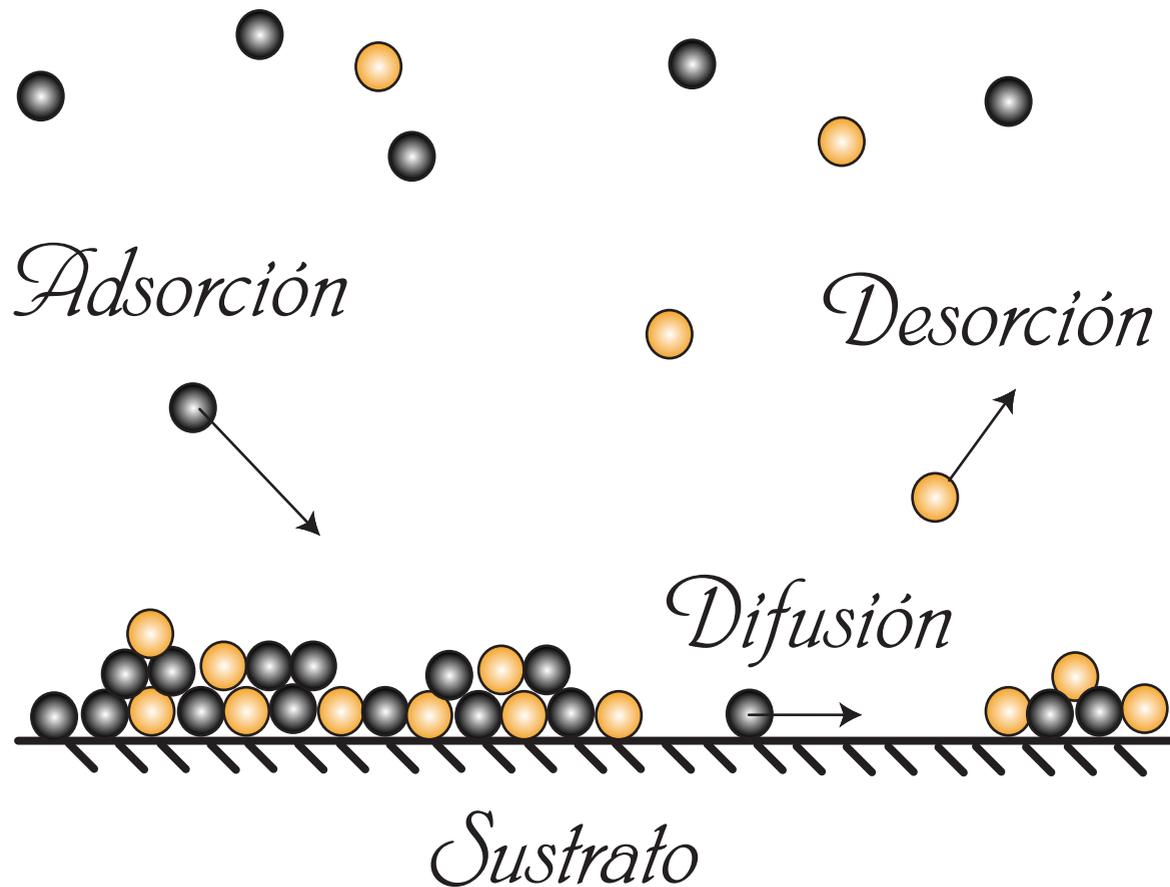
Nano Patrones y nano estructuras en dinámica de recubrimiento de una película delgada

Marcel G. Clerc, Miguel Trejo, Enrique Tirapegui
Departamento de Física, FCFM,
Universidad de Chile



Departamento de Física.
Facultad de ciencias
Físicas y Matemáticas,
Universidad de Chile.

Dinámica de recubrimiento de una película delgada



- Formación de materiales (sólidos)
- La dinámica de recubrimiento tiene tres procesos básicos: **adsorción, transporte y desorción.**
- El modelamiento del crecimiento de películas delgada es una de las más desafiantes actividades de la ciencia de los materiales, ya que los **mecanismo de crecimiento** determinan las **propiedades de la película (eléctricas, elásticas, etc.)** y de **textura**. Es de capital

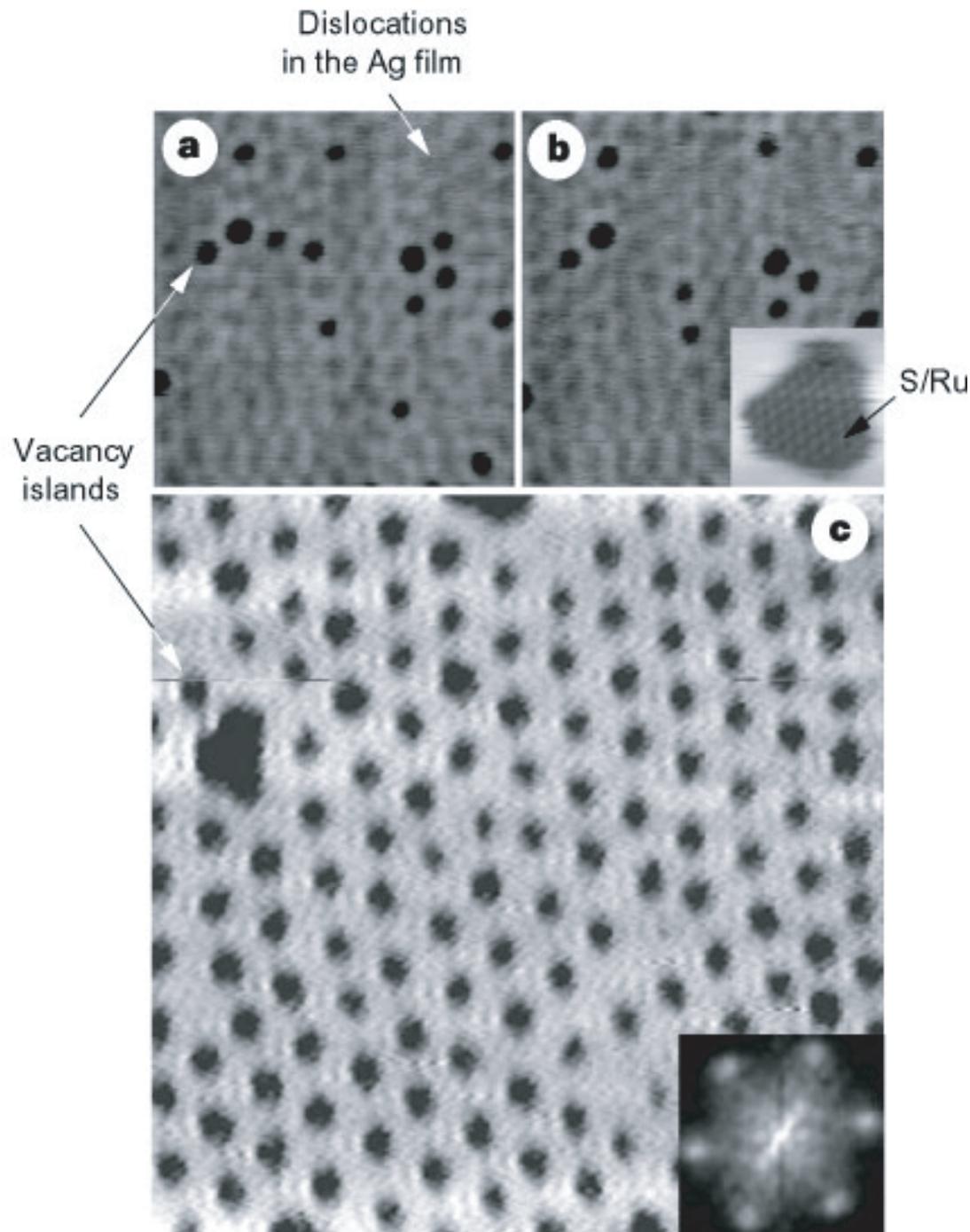
interés científico y tecnológico entender y manejar los procesos de crecimiento.

Problema

*Durante el proceso de recubrimiento de una película delgada, en la cual interactúan los **procesos cinéticos locales** y la ocurrencia simultánea de una **transición de fase**, uno espera encontrar formación y mecanismo de estructuras espaciales, **patrones**. El tamaño de estas estructuras yacen en el rango de los nanómetros.*

¿Que mecanismos originan los patrones?, ¿que tipo de patrones uno observa?, ¿cuál es la dinámica que describe estas estructuras?, ¿que posibles usos pueden tener estas estructuras (device)?, etc.

Observaciones Experimentales (Nano Patrones)

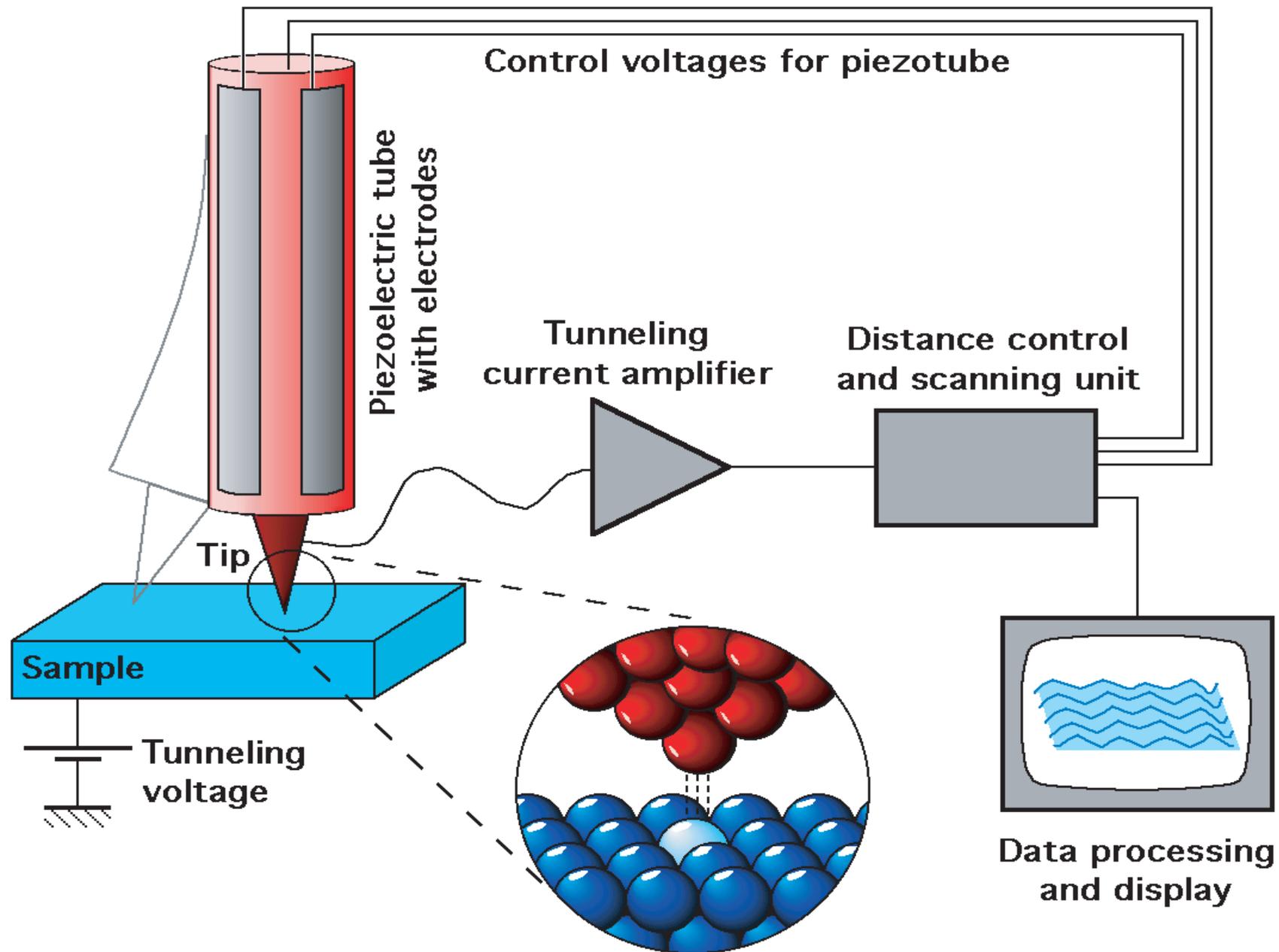


-Deposición de una Monocapa Ag en rutenio(0001) a Temperatura ambiente.

-Observación de estructuras espaciales espontaneas (patrones hexagonales) e Islas de Vacancia (Nano estructuras) de tamaño nanométrico (3nm).

- K. Pohl et al, Nature, 397, 231 (1999)

Microscopio de efecto tunel (STM)



Simulaciones Numéricas

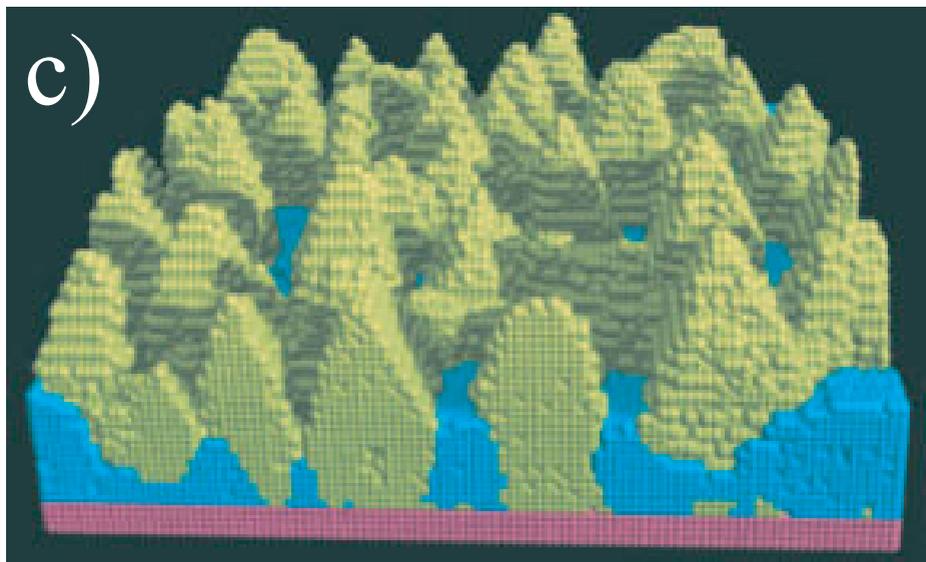
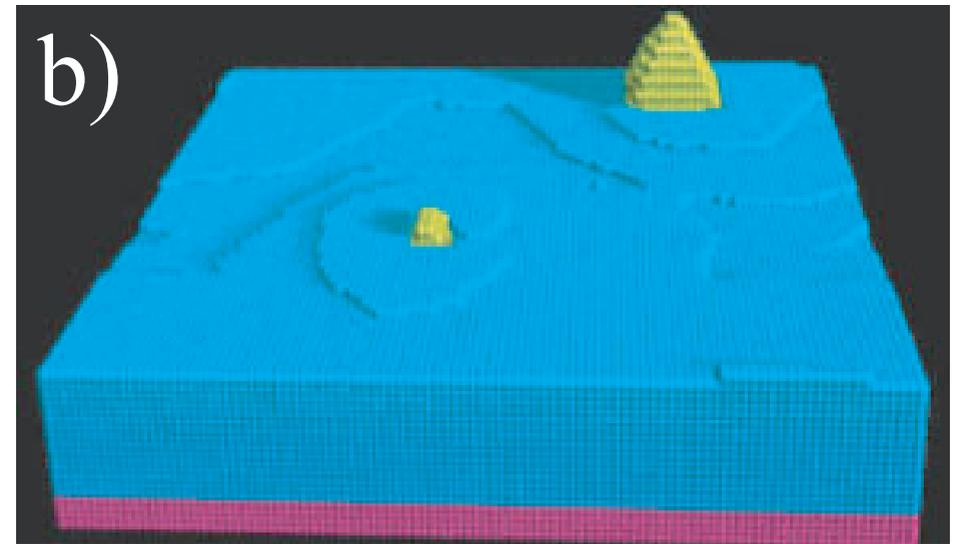
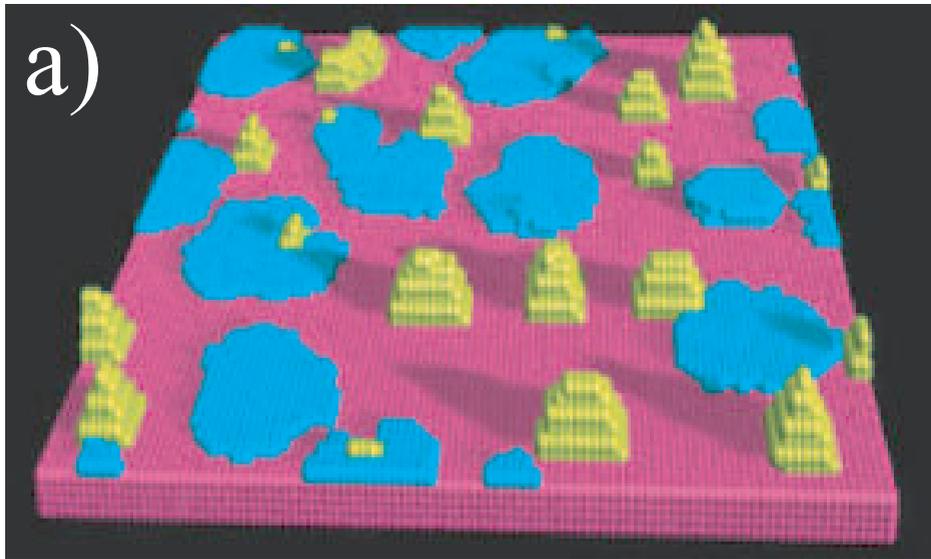
Métodos de **dinámica molecular**, **Montecarlo** y **ecuaciones de reacción difusión** son métodos numéricos usados para describir la dinámica de recubrimientos de películas delgadas

Dinámica Molecular (Ad-initio): desafortunadamente, los tiempos computacionales requeridos para simular una capa delgada con tasas de absorción y desorción realistas son actualmente excesivos o requieren de tasas irrealistas (miles de partículas).

Método de Montecarlo: describe pequeños películas policristalinas con dimensiones del orden del micrón (millón de partículas).

Modelos de reacción difusión: aproximación continua y macroscópica aun es interesante, ya que describe la dinámica de una película delgada de grandes dimensiones y con tasas realistas

Simulaciones Numéricas (Montecarlo)



Simulaciones numéricas usando el **método de Montecarlo** de deposición de aluminio sobre un sustrato amorfo (color violeta), usando deposición típica de sputtering. En la superficie se absorben dos orientaciones (Al-111 y Al-100, Transición de fase). En la figura-a se ilustran las dos fases. Cuando la temperatura es mantenida a un $1/3$ de la temperatura de transición, la fase Al-111 es dominante (Fig.b). Para temperaturas menores $1/9$ de la temperatura de transición domina la fase Al-100 (Fig.c)

Simulaciones Numéricas

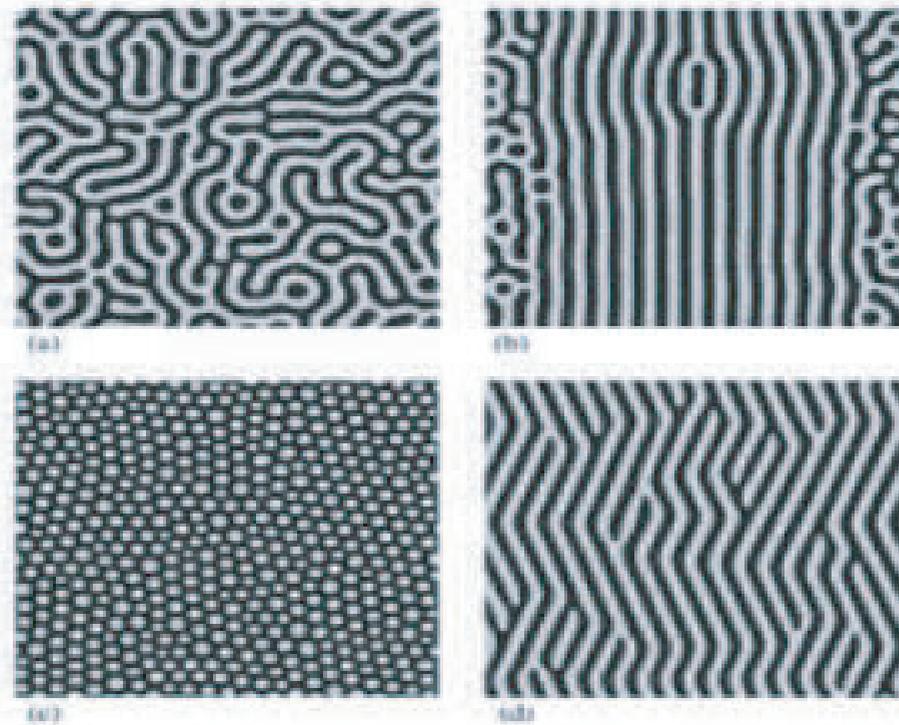
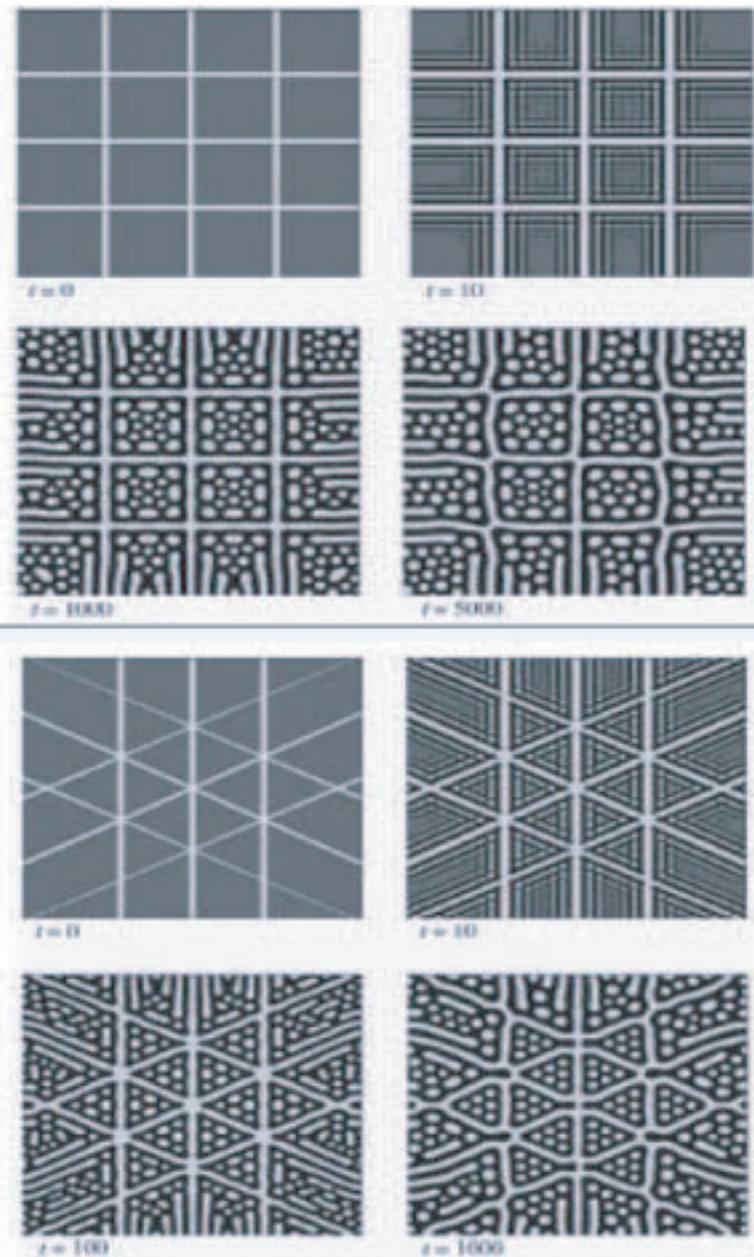
Métodos de **dinámica molecular**, **Montecarlo** y **ecuaciones de reacción difusión** son métodos numéricos usados para describir la dinámica de recubrimientos de películas delgadas

Dinámica Molecular (Ad-initio): desafortunadamente, los tiempos computacionales requeridos para simular una capa delgada con tasas de absorción y desorción realistas son actualmente excesivos o requieren de tasas irrealistas (miles de partículas).

Método de Montecarlo: describe pequeños películas policristalinas con dimensiones del orden del micrón (millón de partículas).

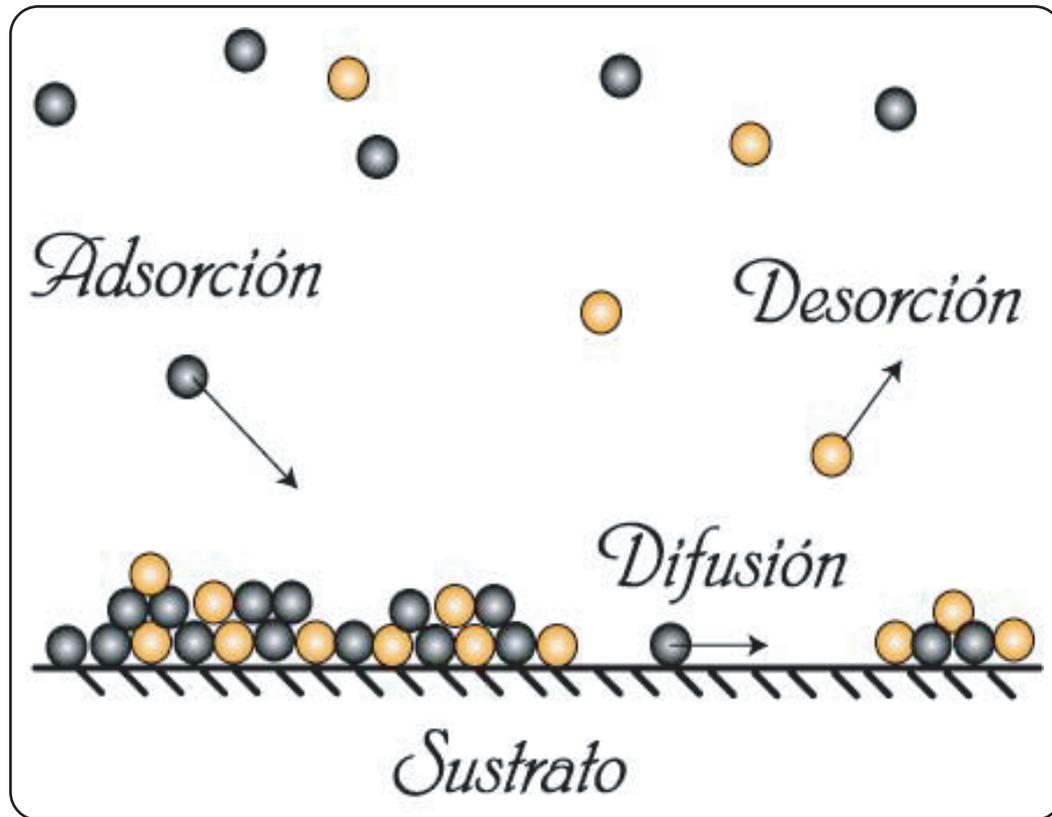
Modelos de reacción difusión: aproximación continua y macroscópica aun es interesante, ya que describe la dinámica de una película delgada de grandes dimensiones y con tasas realistas

Simulaciones de modelos continuos: Reacción-difusión



Simulaciones numéricas de una monocapa absorbida considerando los *efectos del sustrato* (Suo et al, *Journal of nanoparticle research* 2, 333 2000)

Modelo teórico de una monocapa



Modelos continuos que describen la evolución de una monocapa incorporan procesos de reacción o cinéticos locales (adsorción y desorción) y difusión.

$$\partial_t c(\mathbf{r}, t) = R[c(\mathbf{r}, t)] - \nabla \cdot \vec{J}$$

donde $c(\mathbf{r}, t)$ es el recubrimiento molecular local, $R[c, t]$ describe los procesos de reacción y \vec{J} es el flujo de corriente de masa.

Descripción microscópica basada en un modelo tipo *Fsing* (*Lattice Gas*, Walgraef 2002) o ecuación maestras (*Mikaelov* 1999)

Dinámica de la Monocapa

- Corriente de Difusión gobernada por variación del potencial químico φ :

$$\vec{J} = -M(c) \vec{\nabla} \varphi; \quad \varphi = \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} \quad M(c) = \frac{D(c)}{K_B T}$$

Dinámica de la Monocapa

- Corriente de Difusión gobernada por variación del potencial químico φ :

$$\vec{J} = -M(c) \vec{\nabla} \varphi; \quad \varphi = \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} \quad M(c) = \frac{D(c)}{K_B T}$$

- Para calcular \mathcal{F} usamos modelo tipo Ising.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \epsilon_{ij} c_i c_j; \quad \beta F = -\ln Z \quad Z = \text{Tr}\{\exp(-\beta H)\}$$

Dinámica de la Monocapa

- Corriente de Difusión gobernada por variación del potencial químico φ :

$$\vec{J} = -M(c) \vec{\nabla} \varphi; \quad \varphi = \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} \quad M(c) = \frac{D(c)}{K_B T}$$

- Para calcular \mathcal{F} usamos modelo tipo Ising.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \epsilon_{ij} c_i c_j; \quad \beta F = -\ln Z \quad Z = \text{Tr}\{\exp(-\beta H)\}$$

- Teoría de campo medio corregida: $F \approx F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0$.

$$H_0 = K_B T \sum_i \lambda_i c_i \quad F_0 = K_B T \sum_i \ln(1 - \theta_i)$$

Dinámica de la monocapa

- Sea $\theta_i = \langle c_i \rangle_0$. Primera corrección a F se escribe:

$$F = K_B T \sum_k [\theta_k \ln(\theta_k) + (1 - \theta_k) \ln(1 - \theta_k)] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \epsilon_{ij} \theta_i \theta_j$$

Dinámica de la monocapa

- Sea $\theta_i = \langle c_i \rangle_0$. Primera corrección a F se escribe:

$$F = K_B T \sum_k [\theta_k \ln(\theta_k) + (1 - \theta_k) \ln(1 - \theta_k)] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \epsilon_{ij} \theta_i \theta_j$$

- Isotropía y homogeneidad:

$$\epsilon_0 = -\frac{1}{2} \sum_i \epsilon_{ij} = -\gamma \epsilon \quad 2\xi_0^2 = \sum_{ij} \epsilon_{ij} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 = 2\gamma \epsilon a^2$$

Dinámica de la monocapa

- Sea $\theta_i = \langle c_i \rangle_0$. Primera corrección a F se escribe:

$$F = K_B T \sum_k [\theta_k \ln(\theta_k) + (1 - \theta_k) \ln(1 - \theta_k)] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \epsilon_{ij} \theta_i \theta_j$$

- Isotropía y homogeneidad:

$$\epsilon_0 = -\frac{1}{2} \sum_i \epsilon_{ij} = -\gamma \epsilon \quad 2\xi_0^2 = \sum_{ij} \epsilon_{ij} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 = 2\gamma \epsilon a^2$$

- Energía libre continua $\mathcal{F}[c(r)]$

$$\mathcal{F} = \int_S dr (K_B T f(r) + \frac{1}{2} \epsilon_0^2 c(r)^2 - \frac{1}{2} \xi_0^2 |\nabla c(r)|^2)$$

$$f(r) = (1 - c(r)) \ln[1 - c(r)] + c(r) \ln[c(r)]$$

Modelo con tasa de desorción lineal.

- Si consideramos ciertos procesos de deposición: tasa de deposición constantes.

$$R[c(\mathbf{r}, t)] = \alpha[1 - c(\mathbf{r}, t)] - \beta c(\mathbf{r}, t)$$

- El sistema tiene un funcional de Lyapunov cuando las tasa son constantes y no dependen de la cobertura

$$F = \mathcal{F} - \frac{(\alpha + \beta)}{M} \int \int d^D r d^D r' c(\mathbf{r}', t) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') c(\mathbf{r}, t)$$

- El sistema por lo tanto puede escribirse con una energía libre efectiva.

$$\partial_t c = R[c] - M \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} \Rightarrow \partial_t c(\mathbf{r}, t) = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta c(\mathbf{r}, t)}$$

- Por lo tanto la Dinámica es de relajación.

Modelo con Desorción lineal

- Evolución dinámica de la cobertura de una monocapa

$$\partial_t c(\mathbf{r}, t) = \alpha[1 - c(\mathbf{r}, t)] - \beta c(\mathbf{r}, t) + M \nabla^2(\varphi)$$

- Potencial químico φ

$$\varphi = \epsilon_s - \epsilon_o c(\mathbf{r}, t) + K_B T \ln\left[\frac{c(\mathbf{r}, t)}{1 - c(\mathbf{r}, t)}\right] - \xi_o \nabla^2 c(\mathbf{r}, t)$$

Modelo con Desorción lineal

- Evolución dinámica de la cobertura de una monocapa

$$\partial_t c(\mathbf{r}, t) = \alpha[1 - c(\mathbf{r}, t)] - \beta c(\mathbf{r}, t) + M \nabla^2(\varphi)$$

- Potencial químico φ

$$\varphi = \epsilon_s - \epsilon_o c(\mathbf{r}, t) + K_B T \ln\left[\frac{c(\mathbf{r}, t)}{1 - c(\mathbf{r}, t)}\right] - \xi_o \nabla^2 c(\mathbf{r}, t)$$

- Solución estacionaria y homogénea $c_o = \frac{\alpha}{\alpha + \beta}$

Modelo con Desorción lineal

- Evolución dinámica de la cobertura de una monocapa

$$\partial_t c(\mathbf{r}, t) = \alpha[1 - c(\mathbf{r}, t)] - \beta c(\mathbf{r}, t) + M \nabla^2(\varphi)$$

- Potencial químico φ

$$\varphi = \epsilon_s - \epsilon_o c(\mathbf{r}, t) + K_B T \ln\left[\frac{c(\mathbf{r}, t)}{1 - c(\mathbf{r}, t)}\right] - \xi_o \nabla^2 c(\mathbf{r}, t)$$

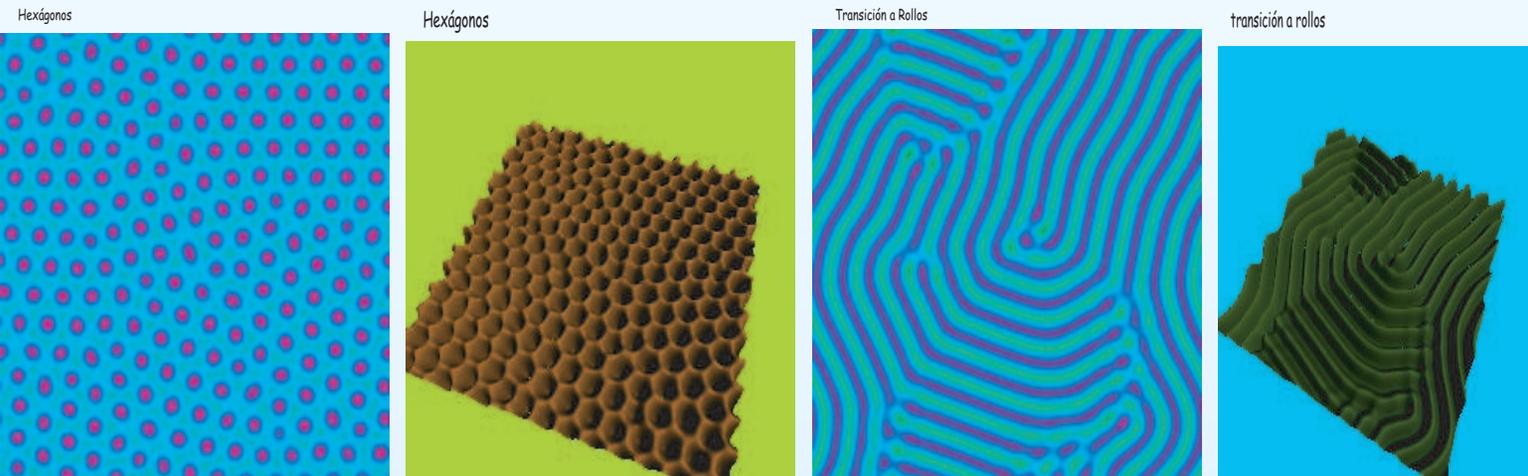
- Solución estacionaria y homogénea $c_o = \frac{\alpha}{\alpha + \beta}$
- Sea $c(\mathbf{r}, t) = c_o + \sigma(\mathbf{r}, t)$, perturbación a este estado. σ es parámetro de orden.

Dinámica de monocapa

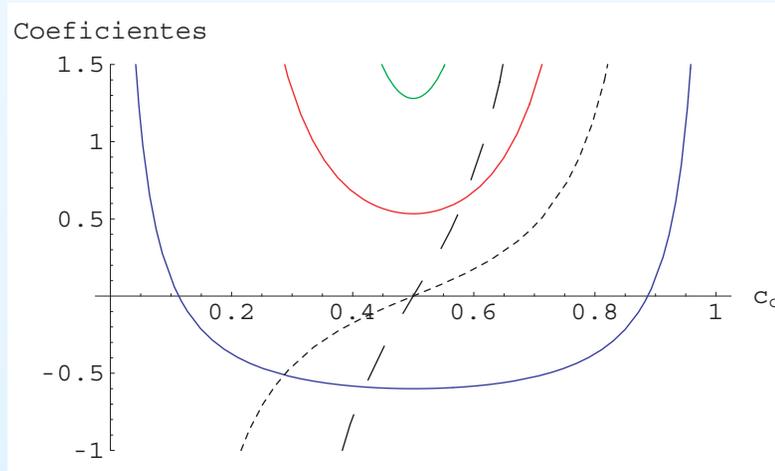
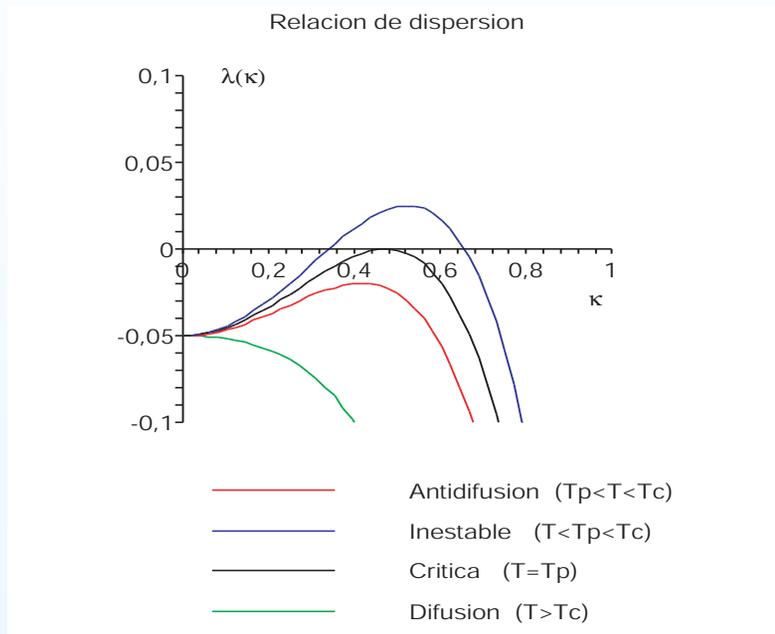
- La ecuación se escribe:

$$\partial_t \sigma(\mathbf{r}, t) = -\Omega \sigma + \Gamma \nabla^2 \left[-\sigma(\mathbf{r}, t) + \mu \ln \left[\frac{c_o + \sigma(\mathbf{r}, t)}{1 - c_o - \sigma(\mathbf{r}, t)} \right] \right] - \nabla^2 \sigma(\mathbf{r}, t)$$

$$\Gamma = \frac{D \epsilon_o^2}{\xi_o^2 K_B T} \quad \Omega = \alpha + \beta \quad \mu = \frac{T}{4T_c}$$



Estabilidad lineal



- Solución c_o se deviene inestable (Walgraef 2002)

$$\lambda(k) = -\Omega - \epsilon k^2 - k^4$$

$$\epsilon = -1 + \frac{\mu}{c_o(1 - c_o)}$$

$$\epsilon_c = -2\sqrt{\alpha + \beta}$$

$$k_c = \sqrt[4]{\alpha + \beta}$$

$$T_p = 4T_c(1 - |\epsilon_c|)c_o(1 - c_o)$$

Régimen débilmente no lineal

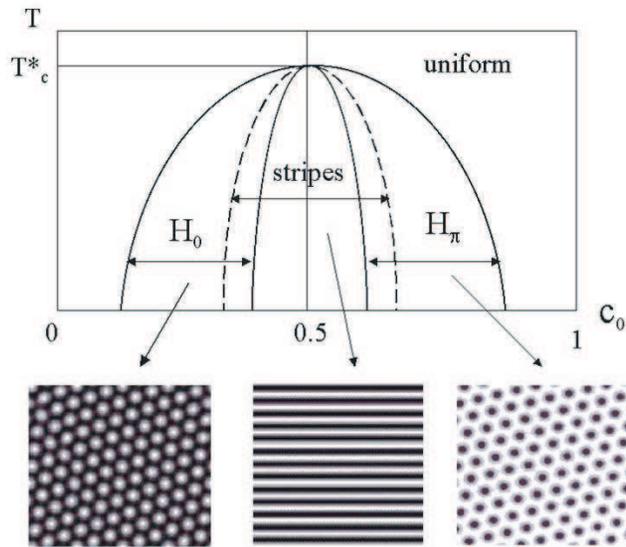
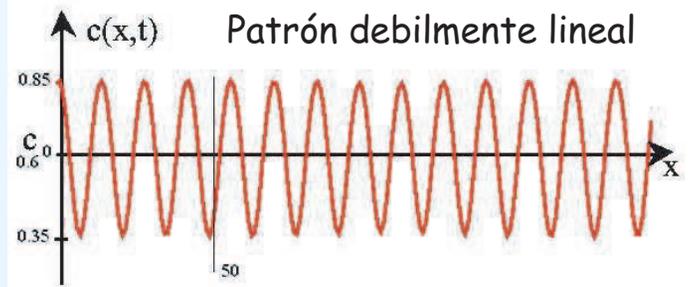


Diagrama de Fases en el plano (T,c), para coeficiente de difusión constante. Al dejar constante T y variar c_0 se ve la transición entre hexágonos y rollos.

- Estudio de selección de patrones (2D)[Walgraef(2002)]

$$\partial_t \sigma = (-\Omega + \epsilon \nabla^2 - \nabla^4) \sigma + \nabla^2 [\omega \sigma^2 + \theta \sigma^3]$$



$x=50$ corresponde a 20 nm. (Para el caso de Al sobre TiN).
 $\lambda = 5.8 \text{ nm}$. $C_0 = 0.6$; $\Gamma = 1$; $\mu = 0.1$

Régimen débilmente no lineal

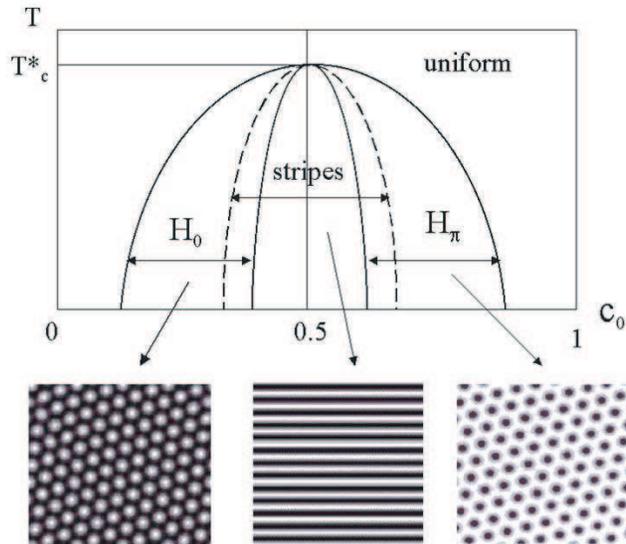
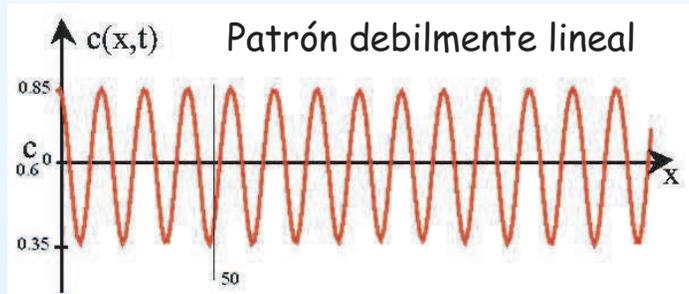


Diagrama de Fases en el plano (T,c), para coeficiente de difusión constante. Al dejar constante T y variar c0 se ve la transición entre hexágonos y rollos.



$x=50$ corresponde a 20 nm. (Para el caso de Al sobre TiN).
 $\lambda = 5.8 \text{ nm}$. $c_0 = 0.6$; $\Gamma = 1$; $\mu = 0.1$

- Estudio de selección de patrones (2D)[Walgraef(2002)]

$$\partial_t \sigma = (-\Omega + \epsilon \nabla^2 - \nabla^4) \sigma + \nabla^2 [\omega \sigma^2 + \theta \sigma^3]$$

- La ecuación de amplitud(1D)

$$\partial_T A = \epsilon A - A|A|^2 + \partial_{YY} A$$

- Donde $\epsilon = \sqrt{\alpha + \beta}$

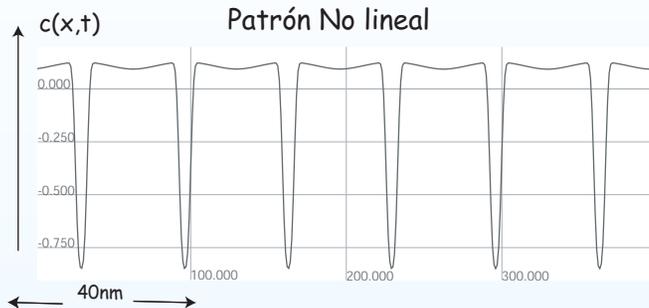
$$\sigma(x, t) = A(T = \delta \epsilon t, Y = (\delta \epsilon)^{\frac{1}{2}} x) e^{ikx} + c.c$$

Aplicaciones a sistemas experimentales

- Especies usadas comunmente Al, Cu, Ti, TiN, (utilizados en micromecanismos de silicio)
- Caso de Al cristaliza en FCC. $a_{Al} = 4.05[\text{Å}]$ a $T = 293[K]$ (4.11[Å] a 800[K])
- Energía de interacción de pares $\epsilon_{ij} \approx -0.0533[eV]$ (Tiene un mínimo alrededor de 4.1[Å])
- Deposición de atomos sobre TiN(100), $\gamma = 4, \epsilon_o = 0.22[eV]$, $T_c = 641[K]$
- Simulaciones de dinámica molecular. $D = 4 \times 10^{-4}[\frac{cm^2}{s}]$ a $T = 700[K]$, $D = 5 \times 10^{-5}[\frac{cm^2}{s}]$ a $T = 500[K]$, $D = \times 10^{-7}[\frac{cm^2}{s}]$ a $T = 300[K]$.
- Tasas del orden de $\Omega \approx 1 \frac{\mu m}{min}$
- en estas condiciones: $\beta = 0.1\alpha, c_o \approx 0.9, T_p \approx 212[K]$

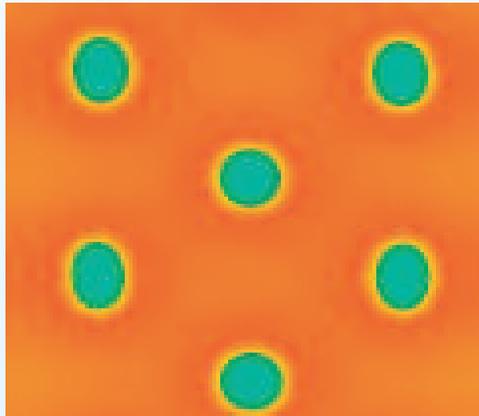
$$\lambda_c \approx 15[nm]$$

Régimen Fuertemente no lineal



Solución Patrón numérica para los valores: $\mu=0.101$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.004325$; $\beta=0.00067$; $C_0=0.865$. En el gráfico $x=50$ corresponde a 20 nm, por lo tanto $\lambda=32$ nm

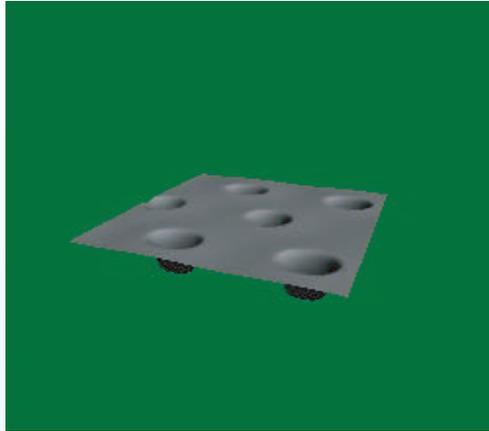
Patrón no lineal en 2D



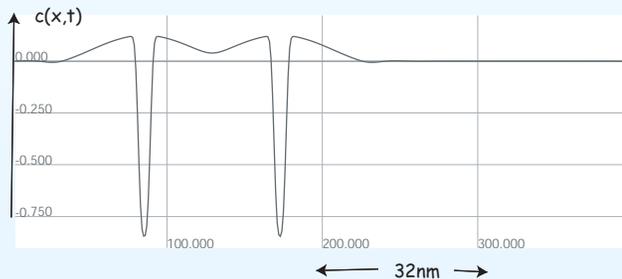
- Observamos (para c_0 muy bajo o muy alto) patrones muy no lineales
- Existen frentes muy no lineales que conectan solución homogénea con un patrón estable.
- No podemos atrapar este régimen con ecuaciones de amplitud.

Régimen Fuertemente no lineal

Patrón no lineal en 3D



Región de Pinning

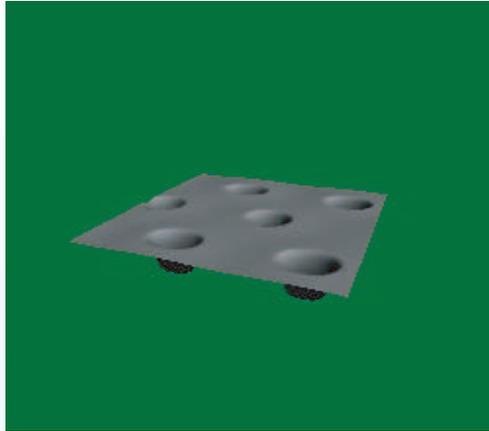


Esta solución numerica corresponde a un patrón localizado en la región de pinning los parámetros son: $C_0=0.865$; $\mu=0.105$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.004325$; $\beta=0.00067$. Nuevamente $\lambda=32$ nm.

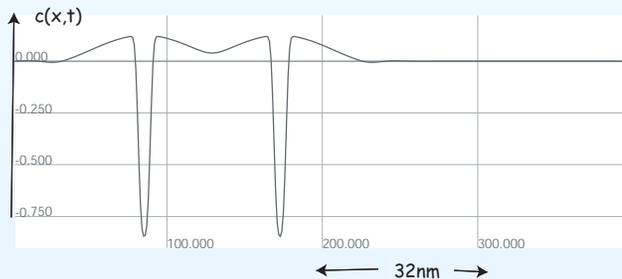
- Estructuras localizadas y patrones localizados existen en el Pinning Range pero son muy no lineales

Régimen Fuertemente no lineal

Patrón no lineal en 3D



Región de Pinning

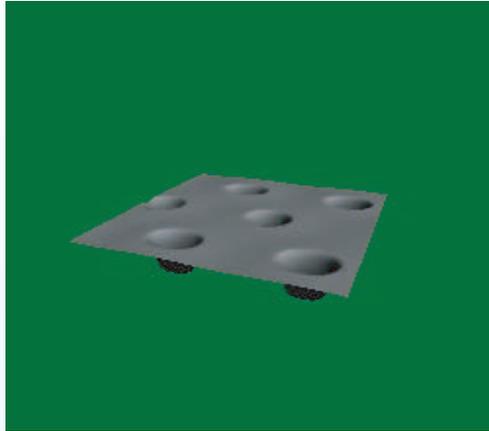


Esta solución numerica corresponde a un patrón localizado en la región de pinning los parámetros son: $C_0=0.865$; $\mu=0.105$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.004325$; $\beta=0.00067$. Nuevamente $\lambda=32$ nm.

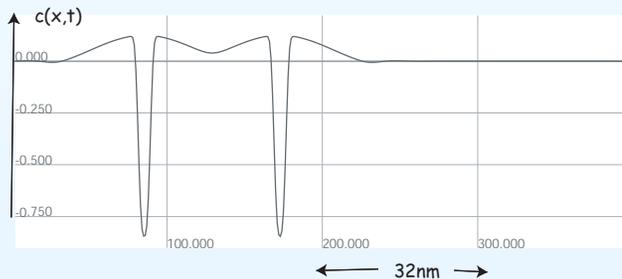
- Estructuras localizadas y patrones localizados existen en el Pinning Range pero son muy no lineales
- observamos frentes que conectan solución homogénea, con patrón .

Régimen Fuertemente no lineal

Patrón no lineal en 3D



Región de Pinning

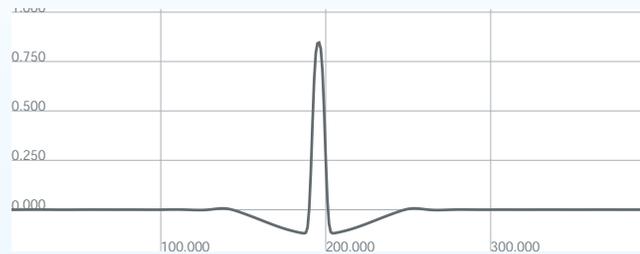


Esta solución numerica corresponde a un patrón localizado en la región de pinning los parámetros son: $C_0=0.865$; $\mu=0.105$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.004325$; $\beta=0.00067$. Nuevamente $\lambda=32$ nm.

- Estructuras localizadas y patrones localizados existen en el Pinning Range pero son muy no lineales
- observamos frentes que conectan solución homogénea, con patrón .

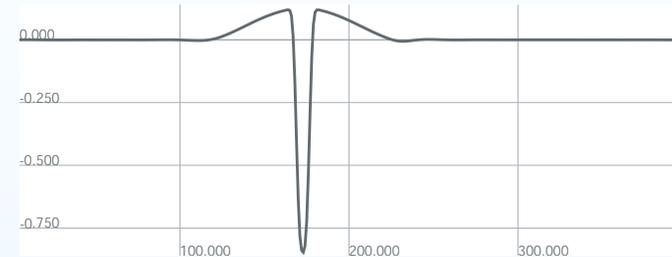
Soluciones tipo partícula, Antidifusión

Adsorión



Estructura Localizada en el rango fuertemente no lineal para los valores: $C_0=0.135$; $\mu=0.101$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.000675$; $\beta=0.004325$. $\lambda=32\text{nm}$ aprox.

Vacantón

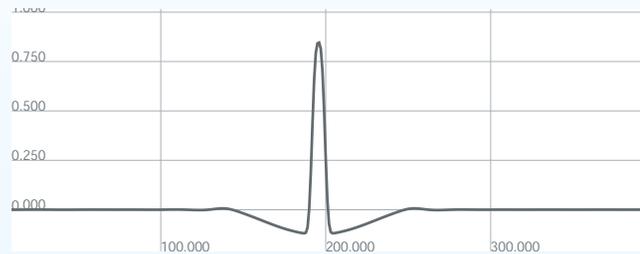


Solución numérica para los valores $C_0=0.865$; $\mu=0.105$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.0043$; $\beta=0.000675$; $\lambda=32\text{ nm}$.

- Viven en una region donde hay difusión

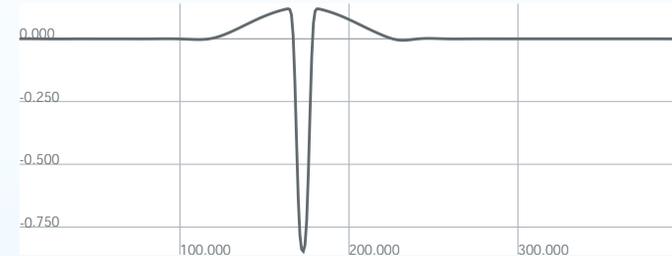
Soluciones tipo partícula, Antidifusión

Adsorción



Estructura Localizada en el rango fuertemente no lineal para los valores: $C_0=0.135$; $\mu=0.101$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.000675$; $\beta=0.004325$. $\lambda=32\text{nm}$ aprox.

Vacantón

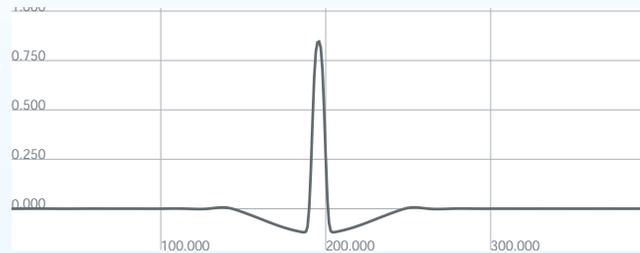


Solución numérica para los valores $C_0=0.865$; $\mu=0.105$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.0043$; $\beta=0.000675$; $\lambda=32\text{nm}$.

- Viven en una region donde hay difusión
- Límite de baja adsorción y desorción ($\Omega \approx 0.005$)

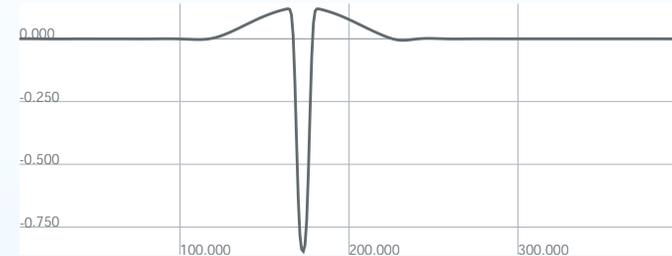
Soluciones tipo partícula, Antidifusión

Adsorción



Estructura Localizada en el rango fuertemente no lineal para los valores: $C_0=0.135$; $\mu=0.101$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.000675$; $\beta=0.004325$. $\lambda=32\text{nm}$ aprox.

Vacantón

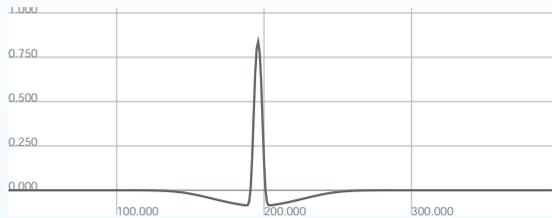


Solución numérica para los valores $C_0=0.865$; $\mu=0.105$; $\Omega=0.005$; $\alpha=0.0043$; $\beta=0.000675$; $\lambda=32\text{ nm}$.

- Viven en una region donde hay difusión
- Límite de baja adsorción y desorción ($\Omega \approx 0.005$)
- Ecuación tipo **Cahn Hilliard debilmente perturbada**

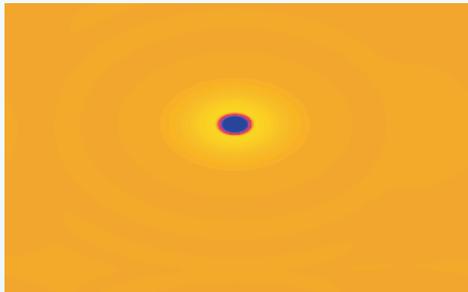
Soluciones tipo partícula

Adsorión

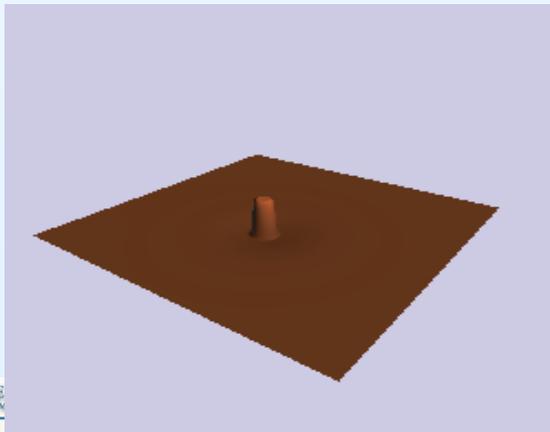


Solución numerica en el regimen de Cahn-Hilliard perturbado. En este caso $C_0=0.1$
 $\Omega=0.005$; $\mu=0.1$; $\alpha=0.0045$; $\beta=0.0005$; $\lambda=31$ nm.

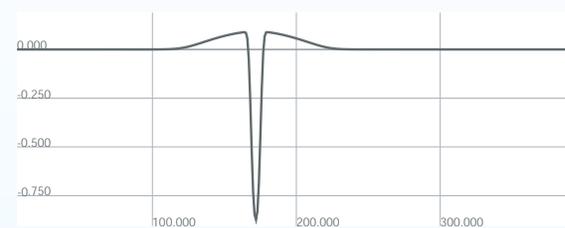
Adsorión en 2d. Régimen Cahn-Hilliard perturbado.



Adsorión 3D. régimen Cahn-Hilliard perturbado.

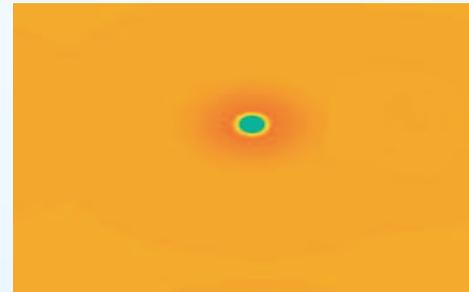


Vacantón (C-H)

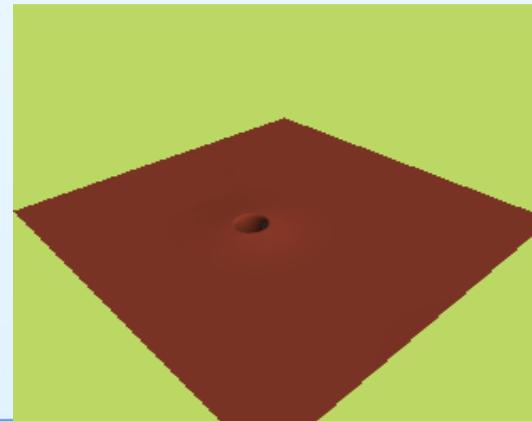


solución numerica de la ecuación en el régimen Cahn-Hilliard perturbado. $C_0=0.9$;
 $\Omega=0.005$; $\mu=0.1$; $\alpha=0.0045$; $\beta=0.0005$; $\lambda=31$ nm.

Vacantón 3D Régimen Cahn-Hilliard perturbado.



Vacantón 3D. Régimen Cahn-Hilliard Perturbado



Cahn-Hilliard Perturbado

- Podemos aproximarnos a las LS considerando el límite de baja tasa de deposición y alta cobertura. $\Omega = 0.005$ y $c_o = 0.9$

Cahn-Hilliard Perturbado

- Podemos aproximarnos a las LS considerando el límite de baja tasa de deposición y alta cobertura. $\Omega = 0.005$ y $c_o = 0.9$
- Trasladando

$$\partial_t \rho = -\tilde{\Omega}(\rho - \rho_o) + \nabla^2 [\tilde{\epsilon} \rho + \rho^3 - \nabla^2 \rho]$$

Cahn-Hilliard Perturbado

- Podemos aproximarnos a las LS considerando el límite de baja tasa de deposición y alta cobertura. $\Omega = 0.005$ y $c_o = 0.9$
- Trasladando

$$\partial_t \rho = -\tilde{\Omega}(\rho - \rho_o) + \nabla^2 [\tilde{\epsilon} \rho + \rho^3 - \nabla^2 \rho]$$

- Cuando $\tilde{\Omega} = 0$ tenemos Cahn-Hilliard

Cahn-Hilliard Perturbado

- Podemos aproximarnos a las LS considerando el límite de baja tasa de deposición y alta cobertura. $\Omega = 0.005$ y $c_o = 0.9$
- Trasladando

$$\partial_t \rho = -\tilde{\Omega}(\rho - \rho_o) + \nabla^2 [\tilde{\epsilon} \rho + \rho^3 - \nabla^2 \rho]$$

- Cuando $\tilde{\Omega} = 0$ tenemos Cahn-Hilliard
- Soluciones tipo burbuja. Interacción Kink-Antikink (M.G. Clerc et al., Phys. Rev. E 71,046210 2005))

$$u_{\pm}(x, x_{\pm}(t)) = \sqrt{|\tilde{\epsilon}|} \tanh\left[\sqrt{\frac{|\tilde{\epsilon}|}{2}}(x - x_{\pm}(t))\right] \quad (4)$$

Cahn-Hilliard Perturbado

- La solución burbuja corresponde a

$$\rho(x, x_{\pm}(t)) = u_{-}(x - x_{-}(t)) - u_{+}(x - x_{+}(t)) - \sqrt{|\tilde{\epsilon}|} + \omega(x_{+}, x_{-}, x)$$

Cahn-Hilliard Perturbado

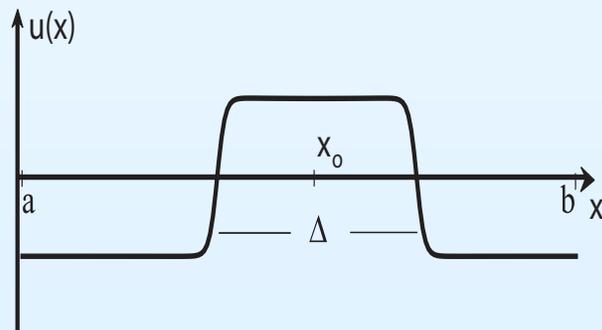
- La solución burbuja corresponde a

$$\rho(x, x_{\pm}(t)) = u_{-}(x-x_{-}(t)) - u_{+}(x-x_{+}(t)) - \sqrt{|\tilde{\epsilon}|} + \omega(x_{+}, x_{-}, x)$$

- Al reemplazar en nuestra ecuacion perturbada se desprecian términos exponencialmente chicos y se llega a una ecuacion del estilo:

$$\mathcal{L}\omega = I$$

$$I \in \text{Im}(\mathcal{L}) \quad I \perp v \quad v \in \text{Ker}(\mathcal{L}^{\dagger}) \quad (7)$$



Cahn-Hilliard Perturbado

- Esto nos permite escribir el adjunto fácilmente

$$\mathcal{L}^\dagger = \tilde{\epsilon} \partial_{xx} - \partial_{xxxx} + 3(u_- - u_+ - \sqrt{|\tilde{\epsilon}|})^2 \partial_{xx}$$

- Entonces si consideramos $\partial_x \psi_\pm = u_\pm$

$$\text{Ker}(\mathcal{L}^\dagger) = \{a, bx, \psi_+, \psi_-\}$$

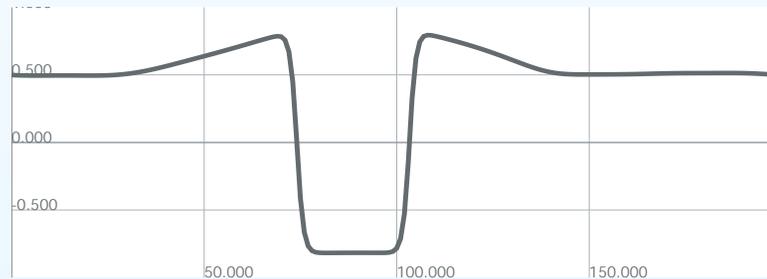
- Podremos encontrar una condición de solvabilidad para el producto $\langle 1 | I \rangle = 0$ que nos dará finalmente una ecuación para el ancho de las LS

$$\dot{\Delta} = \frac{-1}{d(L)} (2\sqrt{|\tilde{\epsilon}|} \Delta - \rho_0 \Omega L)$$

$$\Delta_{eq} = \frac{\rho_0 \Omega L}{2\sqrt{|\tilde{\epsilon}|}}$$

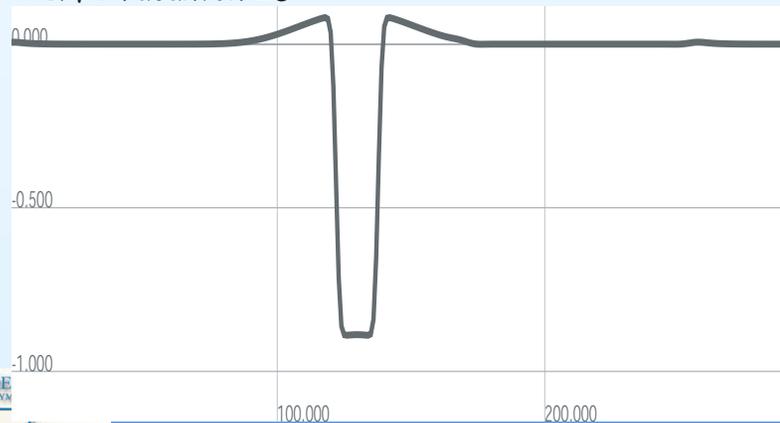
Soluciones CH perturbado

CH perturbado

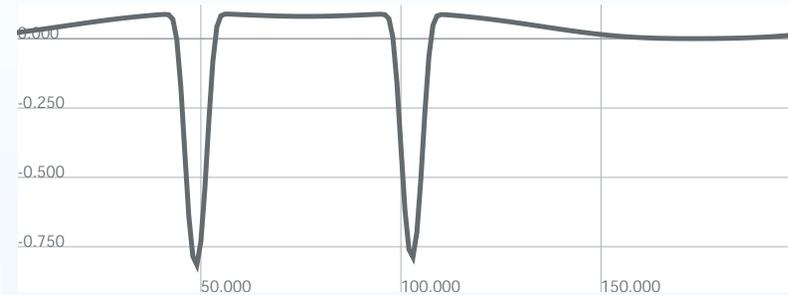


$$\mu=0.1; \Omega=0.005; C_0=0.9$$

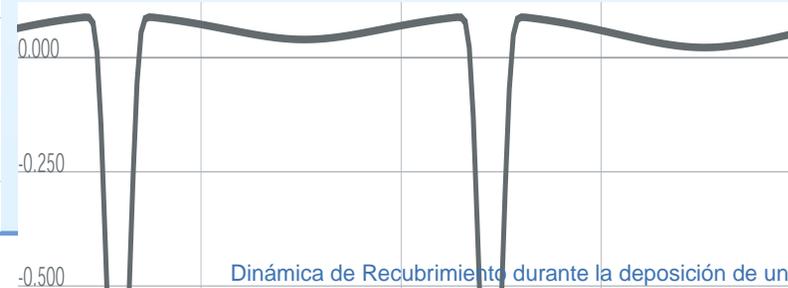
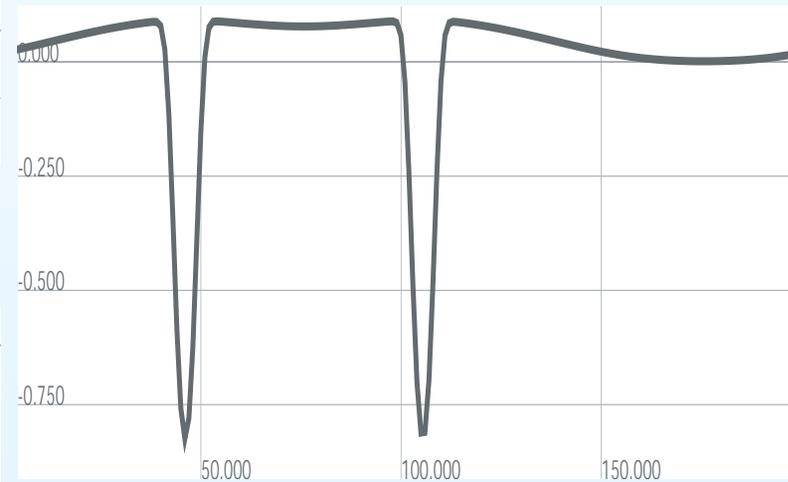
Perfil Vacantón 2D



interaccion de vacantonnes(C-HP)



$$\mu=0.1; \Omega=0.005; C_0=0.9$$



Modelo con Desorción cuadrática

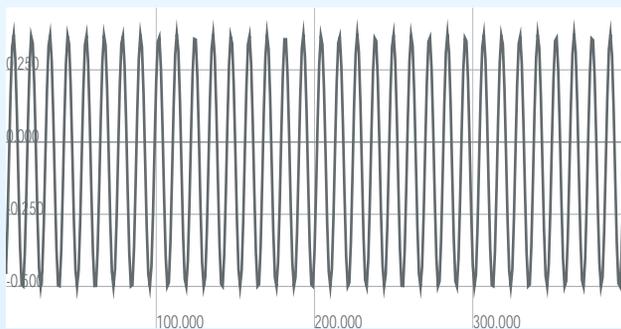
- Consideremos la ecuación para las perturbaciones

$$\partial_t \sigma(\mathbf{r}, t) = -\alpha \sigma - \beta \sigma^2 + \Gamma \nabla^2 [-\sigma(\mathbf{r}, t) + \mu \ln \left[\frac{c_o + \sigma(\mathbf{r}, t)}{1 - c_o - \sigma(\mathbf{r}, t)} \right]] - \nabla^2 \sigma$$

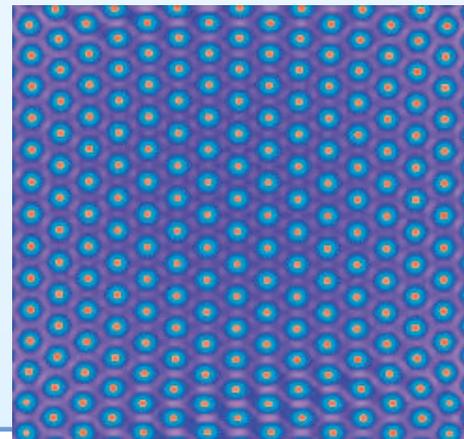
- Donde:

$$\alpha = \alpha_o \sqrt{1 + 4 \frac{\beta}{\alpha_o}} \quad c_o = \frac{\alpha_o}{2\beta} \left[\sqrt{1 + 4 \frac{\beta}{\alpha_o}} - 1 \right]$$

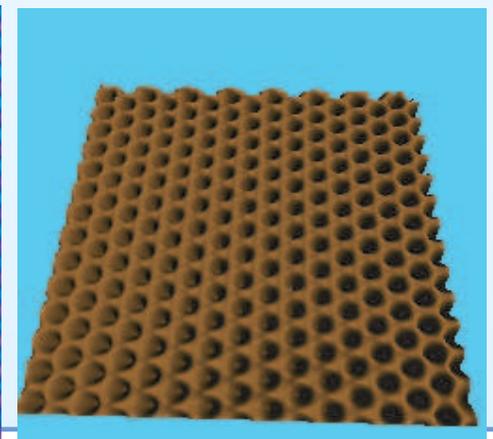
Débilmente NL



Régimen débilmente no lineal 2d



patrón débilmente no lineal



$$\mu = 0.009; \alpha = 0.24; \beta = 0.16; c_o = 0.5$$

Modelo con Desorción cuadrática

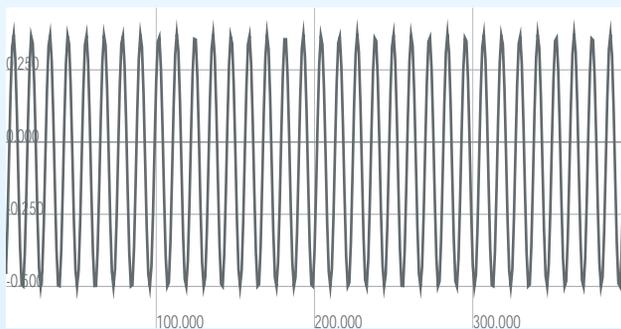
- Consideremos la ecuación para las perturbaciones

$$\partial_t \sigma(\mathbf{r}, t) = -\alpha \sigma - \beta \sigma^2 + \Gamma \nabla^2 [-\sigma(\mathbf{r}, t) + \mu \ln \left[\frac{c_o + \sigma(\mathbf{r}, t)}{1 - c_o - \sigma(\mathbf{r}, t)} \right]] - \nabla^2 \sigma$$

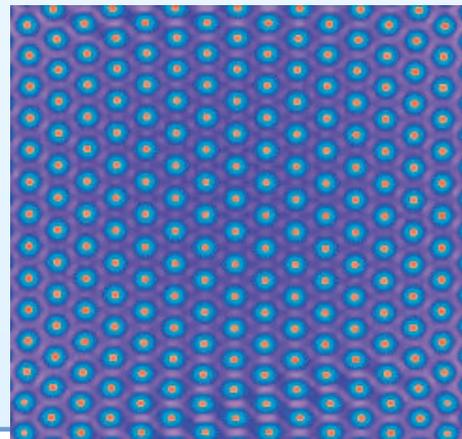
- Donde:

$$\alpha = \alpha_o \sqrt{1 + 4 \frac{\beta}{\alpha_o}} \quad c_o = \frac{\alpha_o}{2\beta} \left[\sqrt{1 + 4 \frac{\beta}{\alpha_o}} - 1 \right]$$

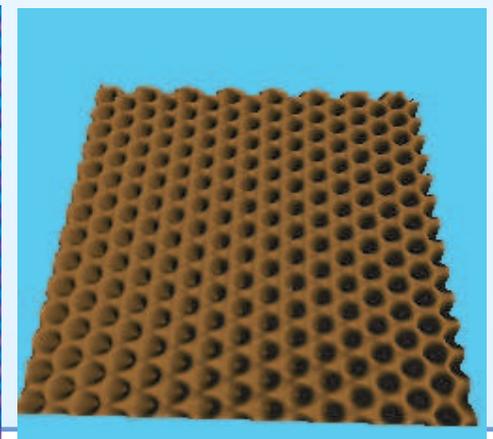
Débilmente NL



Régimen débilmente no lineal 2d



patrón débilmente no lineal



$$\mu = 0.009; \alpha = 0.24; \beta = 0.16; c_o = 0.5$$

Desorción no lineal

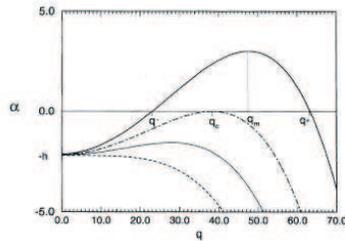


FIG. 1. Behavior of the amplification factor α as one approaches and crosses the marginal stability curve for $t=0.95$. The values are $P=0.98, 0.96, 0.9417$ (marginally), and 0.92 , respectively.

El gráfico de arriba muestra la aparición del modo inestable, para ciertos valores. El gráfico de la izquierda muestra la evolución de arreglos quasihexagonales, Laberintos, patrones e islas que evolucionan en el tiempo. Corresponden a simulaciones numéricas de la ecuación de cahn-Hilliard perturbada por un término cuadrático.

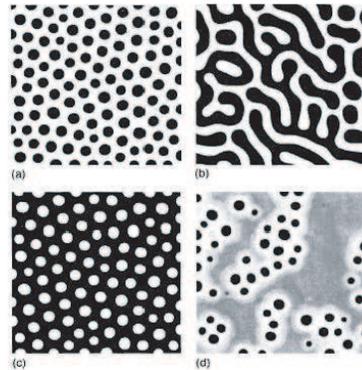
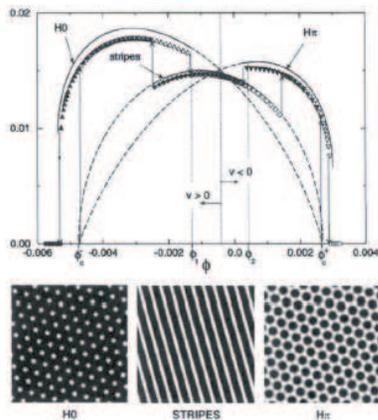


FIG. 2. (a) Quasi-hexagonal array of low coverage droplets at $P=0.8$ ($\theta_s^* \approx 0.08$), at late times ($\tau=246.0$). (b) Interconnected structure at $P=0.54$ ($\theta_s^* \approx 0.013$) and $\tau=170.0$. (c) Array of high coverage droplets at $P=0.4$ ($\theta_s^* \approx -0.037$) and $\tau=250.0$. (d) Emergence of ordered domains at $P=0.96$ ($\tau=0.8$). Dark areas correspond to low coverage and light regions to high coverage. For example, in (d), black circles, white regions, and extended gray areas correspond, respectively, to coverage values of $0.3, 0.7$, and 0.61 ($=\theta_s$).



Patrones obtenidos numéricamente en la ecuación con desorción cuadrática.

- Predicción de patrones en régimen de segregación débil (Verdasca et al 1995)
- Estudio numérico de formación de islas de adsorción
- Región de Histéresis
- Simulaciones numéricas de Cahn-Hilliard super crítico perturbado

Modelo con Desorción cuadrática

- Cálculo de la ecuación de Amplitud. $\sigma(\mathbf{r}, t) = A(Y, T)e^{ikx} + c.c + \omega$

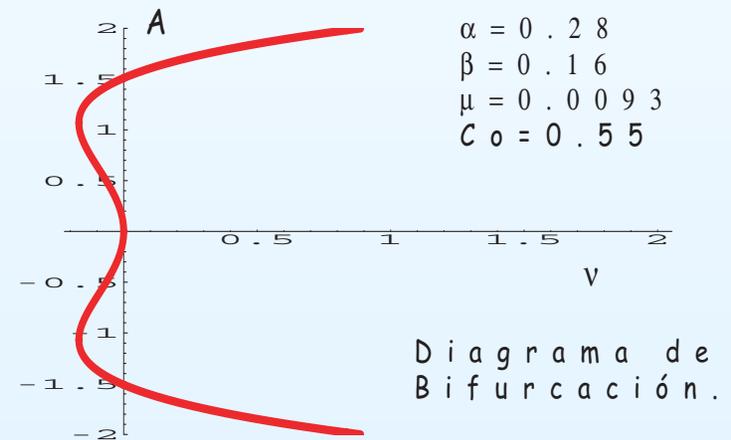
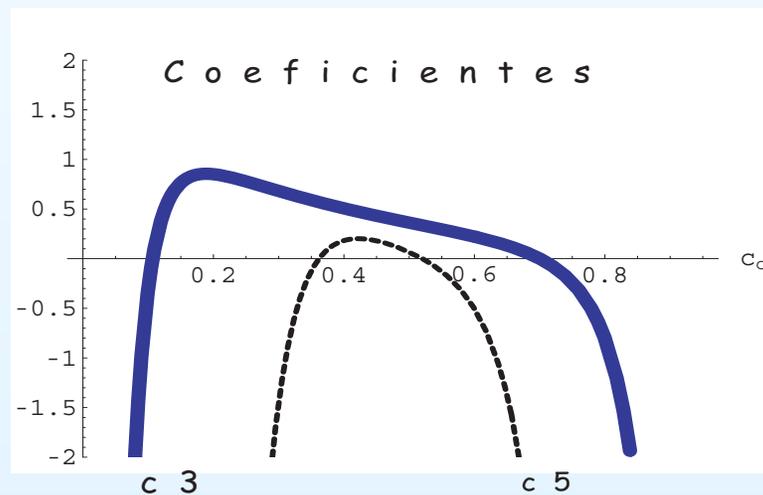
$$\partial_T A = c_1 A + c_3 A|A|^2 + c_5 A|A|^4 + 2\delta\epsilon\epsilon_c \partial_{YY} A + M\bar{A}A^3 e^{ik_c x} + |A|^4 e^{-ik_c x}$$

Modelo con Desorción cuadrática

- Cálculo de la ecuación de Amplitud. $\sigma(\mathbf{r}, t) = A(Y, T)e^{ikx} + c.c + \omega$

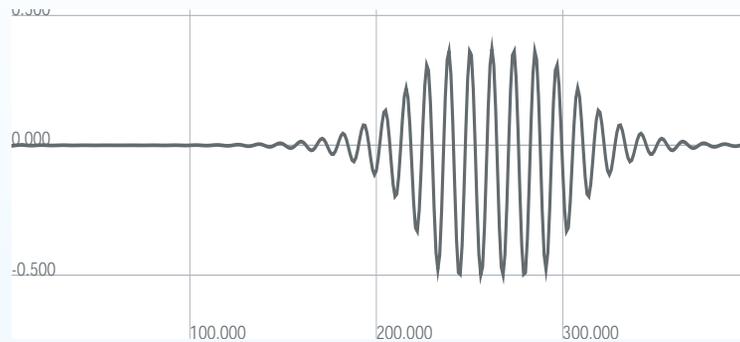
$$\partial_T A = c_1 A + c_3 A|A|^2 + c_5 A|A|^4 + 2\delta\epsilon\epsilon_c \partial_{YY} A + M\bar{A}A^3 e^{ik_c x} + |A|^4 e^{-ik_c x}$$

- Los coeficientes c_i son funciones de los parámetros del sistema. En cierto rango tendremos. (Clerc et al 2005)



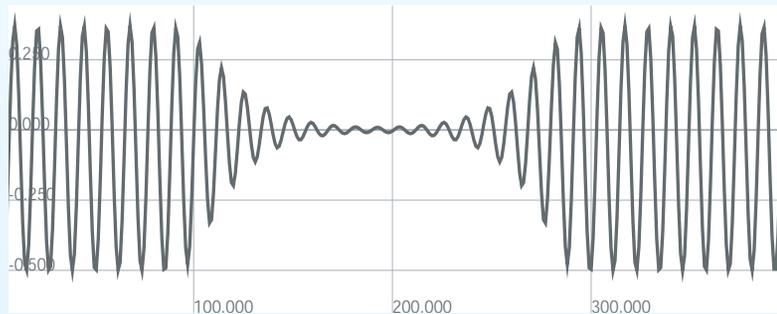
Soluciones numéricas

Patrón Localizado 1D



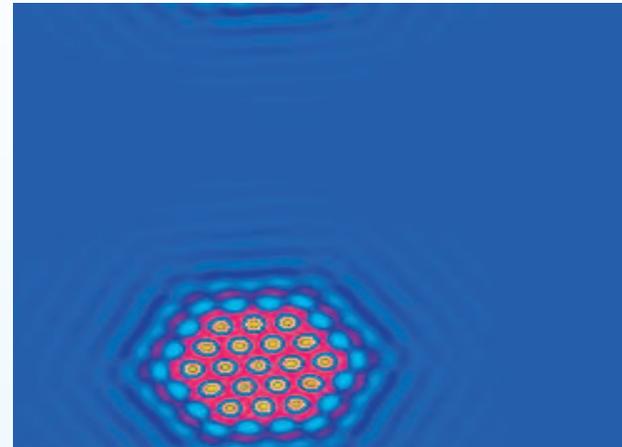
$\mu = 0.0093$; $\alpha = 0.28$; $\beta = 0.16$; $C_0 = 0.55$

Hoyo

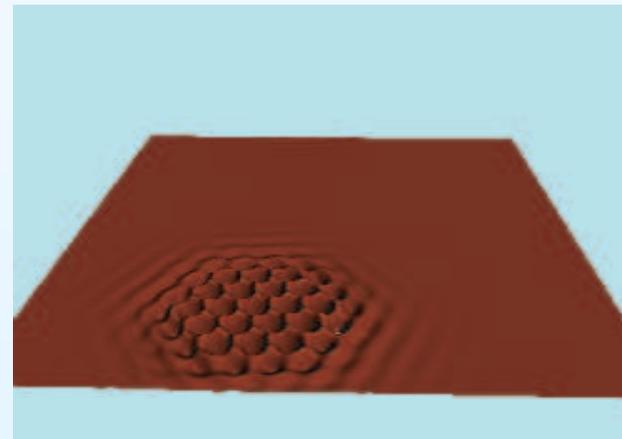


Misma región de parámetros que PL

Patrón Localizado en 2D

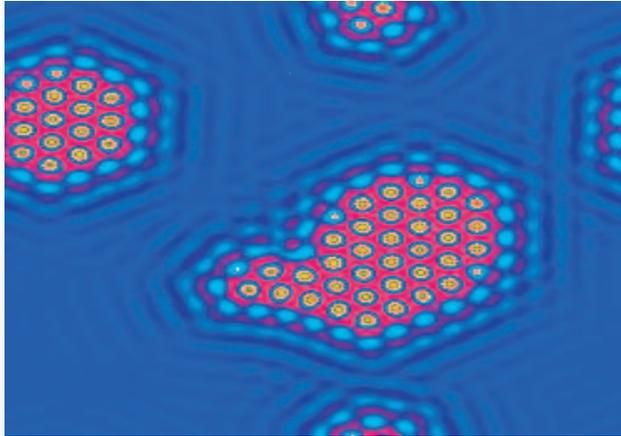


Patrón Localizado en 3D

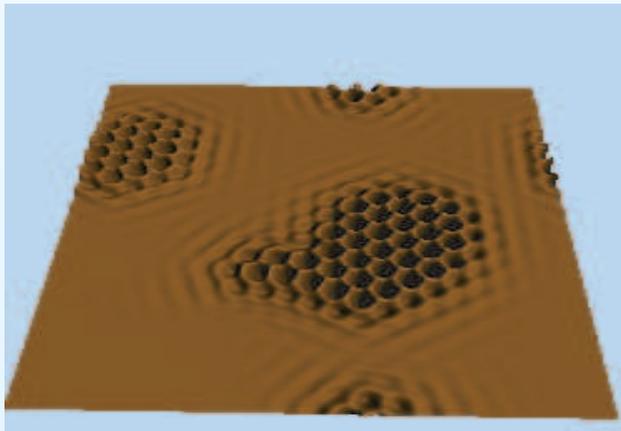


Soluciones numéricas

F r o z e n i s l a n d



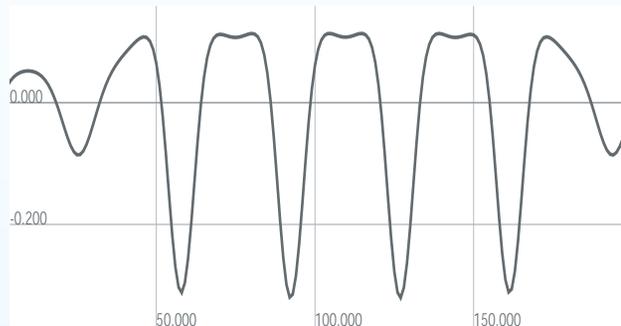
F r o z e n i s l a n d 3 D



- Aparición de dominios de lenta evolución en zona cercana al pinning range (Frozen island)(Verdasca et all)
- Frente cubre toda la región luego de un tiempo.

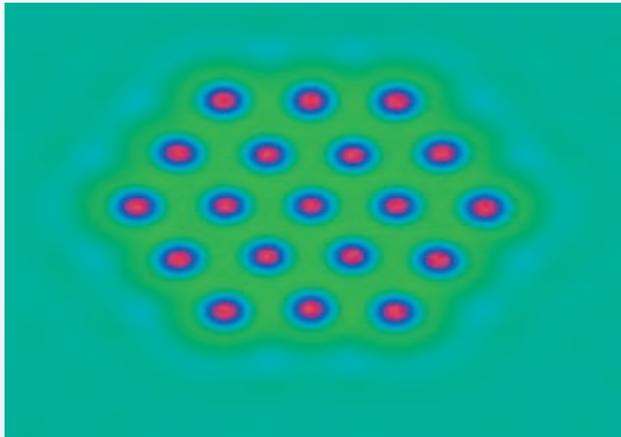
Soluciones numéricas

Patrón localizado



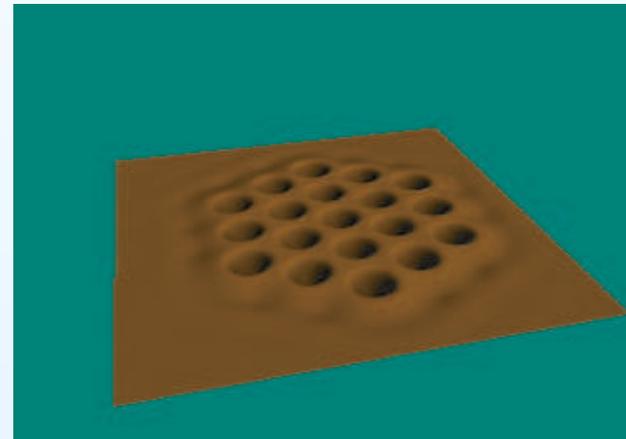
$$\mu = 0.18; \alpha = 0.006; \beta = 0.002; C_0 = 0.69$$

Patrón Localizado en 2D



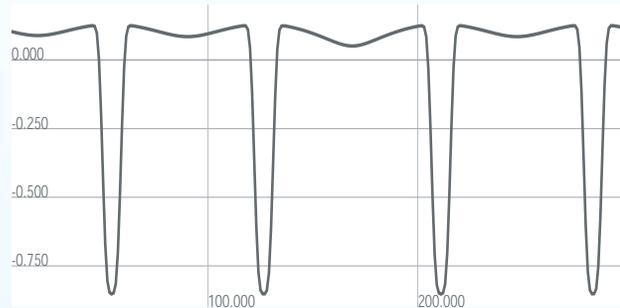
- Patrón Localizado altamente no lineal. Región de Pinning Range

Patrón Localizado 3D



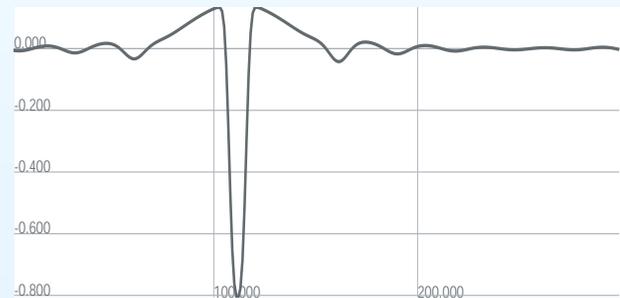
Soluciones numéricas

Patrón no lineal



$C_0 = 0.862$; $\mu = 0.1$; $\alpha = 0.005$; $\beta = 0.007$

Patrón localizado



$C_0 = 0.837$; $\mu = 0.117$; $\alpha = 0.006$; $\beta = 0.16$.

- Persisten soluciones de desorción lineal para bajas tasas de deposición.
- Se observa región de Pinning.

Conclusiones

Durante el proceso de recubrimiento de una monocapa, en la cual interactúan los procesos cinéticos locales y la ocurrencia simultánea de una transición de fase, el sistema exhibe la formación espontánea de estructuras espaciales (nano estructuras, patrones y estructuras localizadas).

Patrones, estructuras localizadas (islas de vacancia o adsorción), y patrones localizados, pueden observarse en modelos con tasas de deposición lineal y no lineal lejos del punto de transición.

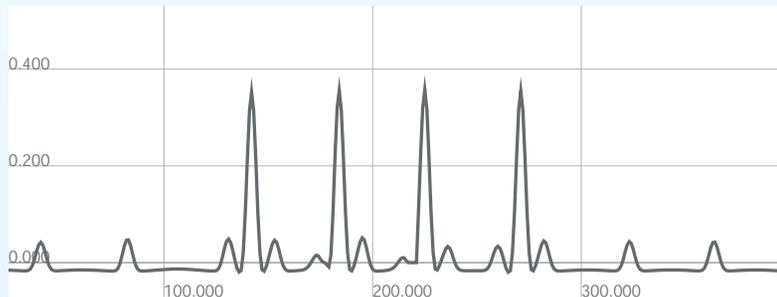
Aproximaciones tipo Cahn-Hilliard perturbado nos permite analíticamente explicar los vacantes y absorbones .

Una ecuación de amplitud forzada espacialmente nos permite explicar analíticamente la aparición de patrones localizados.

Prospectos Futuros



Superpeacks



- Estudio numérico y teórico de Estructuras localizadas "Superpeacks".
- Estudio de modelos que involucren difusión no lineal. superficial