

Neste trabalho, estudamos os processos de nucleação, formação e crescimento de nanopartículas obtidas por tratamento térmico de um filme dielétrico, previamente dopado por implantação de íons de baixa energia. Busca-se controlar o processo de crescimento das partículas influenciando-se os parâmetros físicos que governam o crescimento das mesmas: o coeficiente de difusão dos átomos em solução na matriz e a energia de superfícies das nanopartículas. Tal objetivo pode ser atingido submetendo o filme dielétrico a uma irradiação de íons de alta energia durante ou posteriormente ao tratamento térmico da amostra.

Um sistema modelo escolhido para este estudo são nanopartículas de chumbo (Pb) encapsuladas em sílica (SiO<sub>2</sub>), que foram sintetizadas por implantação iônica e caracterizadas através das técnicas de Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford (RBS) e Microscopia Eletrônica de Transmissão (MET). Em particular, observou-se que o processo de irradiação das nanopartículas, posteriormente à sua formação, levou à "*evaporação*" das mesmas, o que se manifesta pela formação de nanopartículas satélites em torno das partículas originais.

A interpretação dos resultados dos experimentos de irradiações das nanopartículas não é trivial e requer a separação dos processos termodinâmicos dos processos balísticos de transferência de energia cinética do feixe aos átomos constituintes das nanopartículas. Diversos programas permitem simular o processo de interação de feixes de íons com a matéria. Entre eles, os mais conhecidos são o TRIM e o MARLOWE. Tais programas combinam técnicas Monte-Carlo com a aproximação de colisões binárias (Binary Collision Approximation - BCA) e permitem simular as cascatas de colisão geradas durante o freamento de um íon implantado em uma amostra com superfície ou interfaces planas. O processo de evaporação de nanopartículas submetidas à irradiação com feixe iônicos decorre da recombinação incompleta de defeitos pontuais no entorno da interface esférica (e de raio de curvatura nanométrico) entre a nanopartícula e o meio dielétrico. Desta forma, estamos implementando modificações ao programa TRIM, a fim de que este permita a simulação da irradiação de nanopartículas. Nesta apresentação, as modificações implementadas no TRIM e a metodologia utilizada para testá-las serão discutidas em detalhe. Os resultados experimentais referentes às irradiações de nanopartículas de Pb serão discutidos à luz dos resultados das simulações.