

Felipe Dal Ponte Bregalda<sup>1</sup>; Pedro Luis Grande<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Engenharia Física, Laboratório de Implantação Iônica (IC), Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil – felipebregalda@hotmail.com

<sup>2</sup>Laboratório de Implantação Iônica, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil

## Introdução

A técnica de espalhamento de íons de média energia (MEIS) baseia-se no princípio do RBS (Rutherford backscattering spectrometry). Com o auxílio desta técnica é possível investigar a superfície de uma amostra com uma resolução de alguns angstroms. Utilizada em conjunto com o software POWERMEIS, é possível assim estudar materiais nanoestruturados.

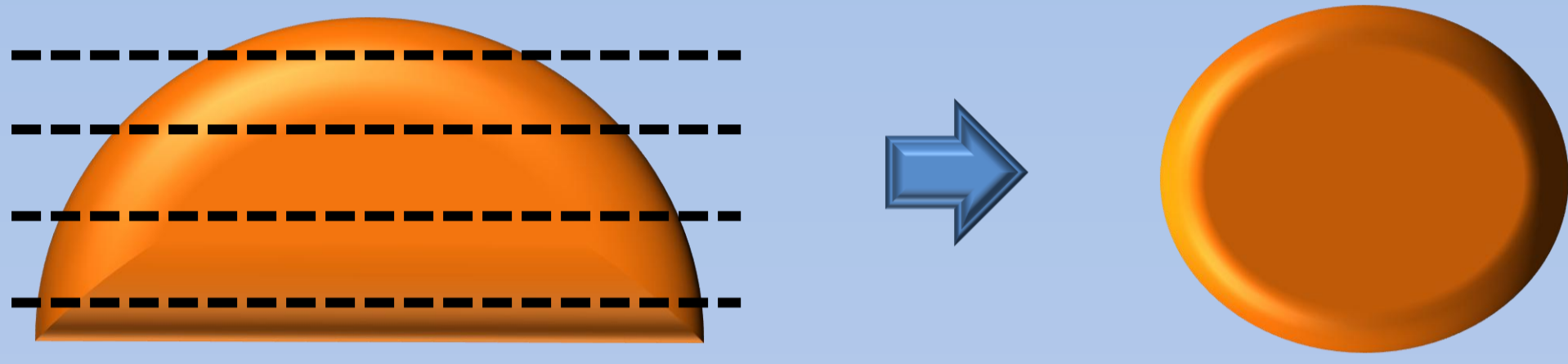


Figura 1 – Exemplo de nanoestrutura: uma semi esfera em corte e a vista superior de uma das camadas.

## Objetivos

Com o objetivo de caracterizar nanoestruturas o software PowerMeis foi desenvolvido. Ele simula espectros de MEIS de nanoestruturas, que serão comparados ao espectro da amostra em questão e dessa forma caracterizá-la. A fim de facilitar a caracterização dessas amostras, esse trabalho tem como objetivo aprimorar o PowerMeis, tornando-o versátil e capaz de simular diferentes distribuições de nanopartículas.

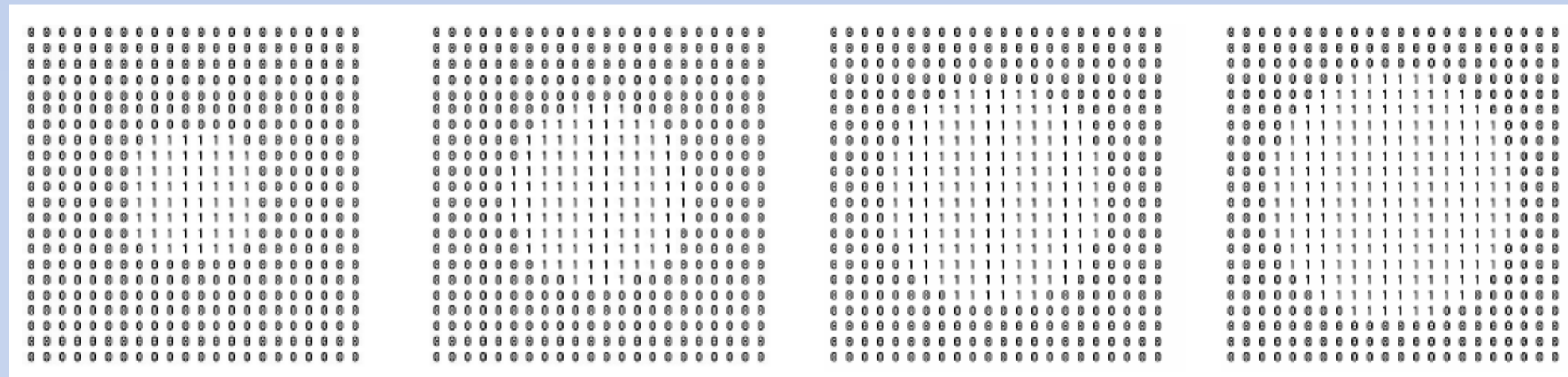


Figura 2 – Matriz utilizada pelo PowerMeis para simular o espectro da nanoestrutura mostrada na Figura 1.

## Metodologia

O software PowerMeis simula seus espectros através de uma matriz tridimensional. Com o intuito de facilitar a construção da mesma, foi desenvolvido um software chamado GMatrix. Esse software programado em linguagem Python permitirá ao usuário comum, de maneira simples, criar suas próprias matrizes de nanoestruturas.

O GMatrix deve ser capaz de construir matrizes de nanoestruturas nas suas mais diversas formas, tamanhos e distribuições. O programa permitirá que o usuário simule espectros de MEIS rapidamente apenas alterando parâmetros simples, tornando mais fácil a caracterização da amostra.

Dessa maneira, surge a necessidade de criar um código que se adéque às necessidades de cada usuário, fazendo assim que não seja necessário um conhecimento avançado de programação para a simulação do espectro correspondente. E assim, investigar diferentes nanoestruturas estudadas no Laboratório de Implantação Iônica.

## Resultados e Discussões

O software GMatrix retira os dados fornecidos pelo usuário de um arquivo padrão. O formato desse arquivo foi construído de maneira que qualquer usuário possa acrescentar uma nova forma geométrica para sua nanoestrutura sem que seja necessário alterar o GMatrix.

Primeiramente, ele cria um arquivo contendo uma matriz bidimensional com pontos aleatórios. A partir desse arquivo e dos dados fornecidos pelo usuário, o GMatrix faz crescer uma nanoestrutura esférica de raio definido com centro nos pontos aleatórios. Após isso, ele cria um arquivo semelhante ao mostrado na Figura 2, com cada uma das camadas da amostra. Como um arquivo semelhante a esse se torna muito pesado quando a nanoestrutura possuir dimensões muito grandes, foi desenvolvido um método para compactar os dados do arquivo de saída, reduzindo em mais da metade o tempo de criação do arquivo e também o seu tamanho.

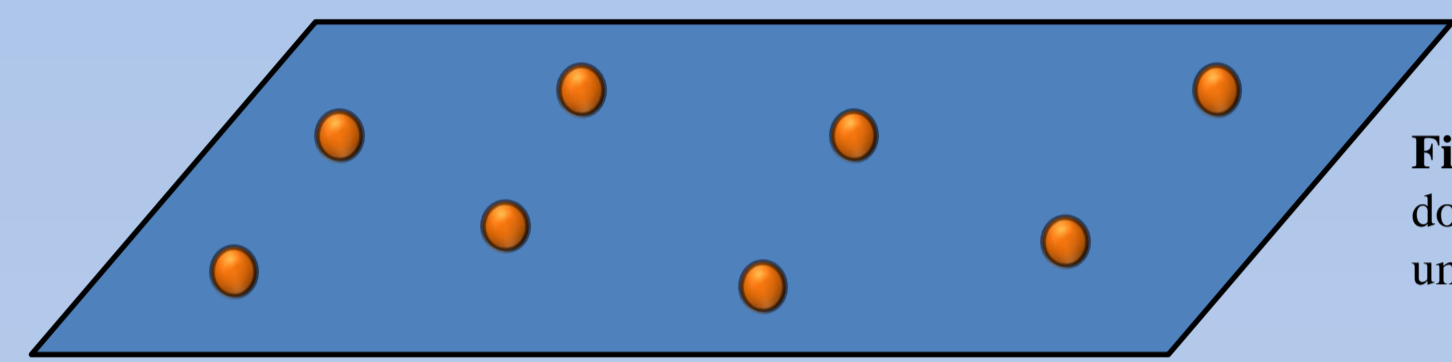


Figura 3 – Representação dos pontos aleatórios em uma matriz bidimensional

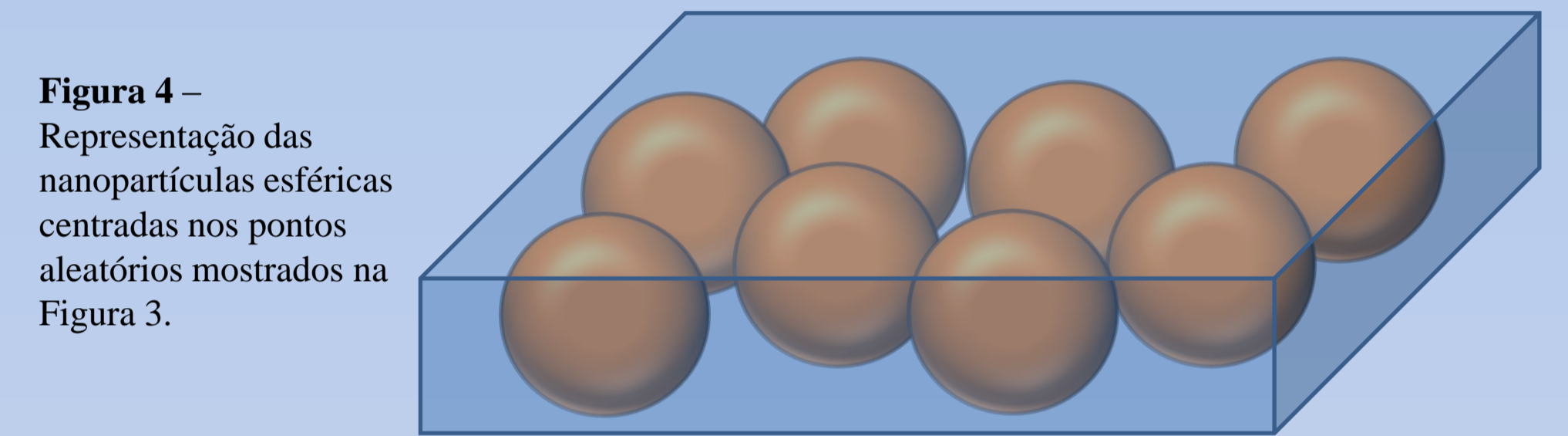


Figura 4 – Representação das nanopartículas esféricas centradas nos pontos aleatórios mostrados na Figura 3.

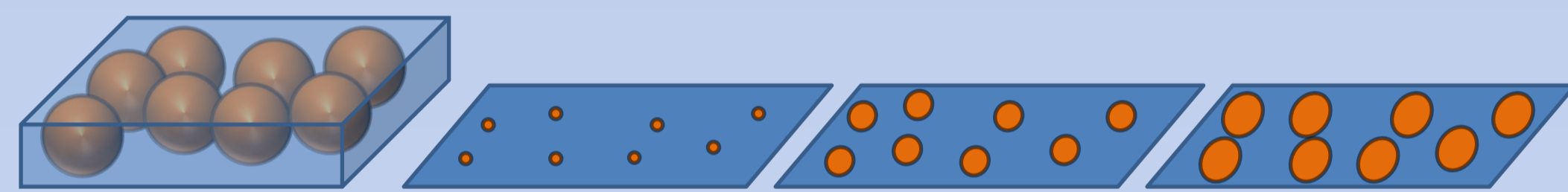


Figura 5 - Representação da figura 4 em cortes, formada a partir de matrizes bidimensionais. Da esquerda para a direita, aparece a nanoestrutura original, uma das camadas inferiores, uma camada mais acima e uma camada próxima ao centro da nanoestrutura.

O software PowerMeis utiliza um arquivo contendo as diversas camadas bidimensionais de uma determinada nanoestrutura e simula o espectros de MEIS. Dessa forma, pode ser comparado ao espectro obtido através da análise por feixe de íons utilizando a técnica MEIS presente no Laboratório de Implantação Iônica e caracterizar a amostra.

## Considerações Finais

O GMatrix, atualmente, possui apenas um módulo que cria as matrizes das nanoestruturas contendo nanopartículas esféricas. Conforme a necessidade dos usuários, serão criadas novos módulos e com eles será criado um banco de dados. Dessa forma, não é necessário criar-se um novo módulo toda vez que for necessário, basta resgatar do banco de dados.

Esse método torna o processo de criação das matrizes muito mais rápida e economiza espaço na memória. O software permite também que se façam alterações simples apenas alterando o arquivo de parâmetros, não sendo necessário o conhecimento de linguagens de programação pelo usuário.

## Referências

- [1] Maurício de Albuquerque Sortica, Exame de qualificação ao Mestrado: **Caracterização de nanoestruturas através da técnica MEIS**, Porto Alegre (2009). Curso de Pós-Graduação do IF-UFRGS.
- [2] Chu, Wei-Kan; Mayer, James W.; Nicolet, Marc-A. - **Backscattering spectrometry** - Editora Academic Press.

## Agradecimentos