

Modelo computacional para o estudo da irradiação de íons em nanopartículas

Guilherme D. Kolinger¹, Flavia P. Luce¹, Paulo F. P. Fichtner², Gustavo M. Azevedo¹

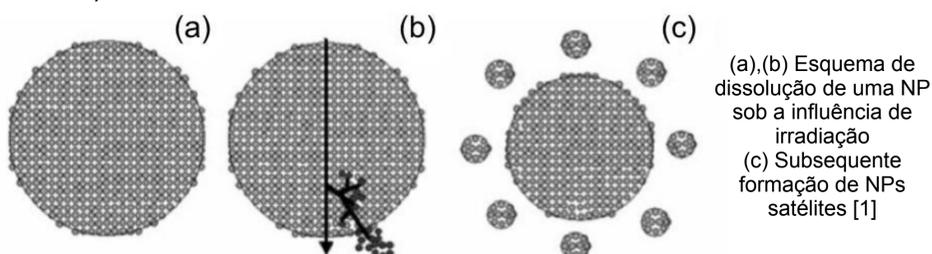
¹Instituto de Física – Departamento de Física

²Escola de Engenharia – Departamento de Engenharia Metalúrgica



Introdução

Nanopartículas (NPs) apresentam um alta razão entre sua área de superfície e seu volume, por isso apresentam diversas propriedades diferentes do material massivo (bulk). Elas têm inúmeras aplicações tecnológicas, portanto são muito importantes no mundo moderno. Pode-se criar NPs através de implantação iônica (supersaturando uma matriz-alvo) seguida de tratamentos térmicos. Tal procedimento permite controlar o tamanho médio das NPs criadas, mas não a dispersão de tamanhos [1,2]. Para controlar esta dispersão foi proposta a utilização da irradiação de um feixe de alta energia [1], atuando como uma força de oposição aos processos termodinâmicos de nucleação e difusão estimulados pelos tratamentos térmicos, tendendo a diminuir o tamanho das NPs. Esta evaporação das NPs ocorre devido à recombinação incompleta dos defeitos gerados pelos processos balísticos envolvidos na interação com o feixe (esquema abaixo).



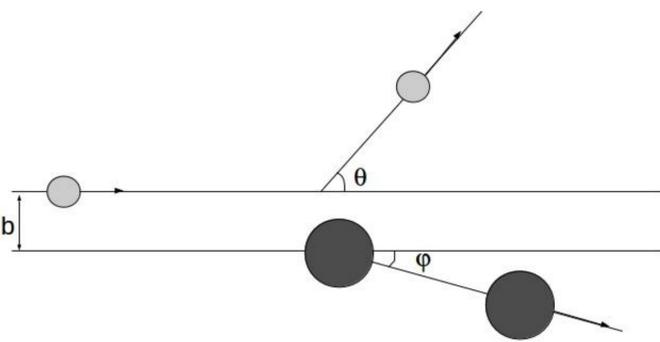
(a),(b) Esquema de dissolução de uma NP sob a influência de irradiação
(c) Subsequente formação de NPs satélites [1]

Para estudar as cascatas de colisões geradas pela irradiação, aprimoramos um conhecido programa computacional de simulação dos efeitos de uma irradiação em um alvo, o TRIM (*Transport of Ions in Matter*). Com nossa modificação, é possível simular um alvo esférico, assim podemos estudar como as colisões balísticas do feixe de íons interagem com a nanopartícula; uma simulação que até hoje não podia ser feita. Chamamos este programa de TARDISS (*TRIM Adaptation to Record the Damage in an Irradiated Spherical Structure*, em português: Adaptação do TRIM para gravar os danos de uma estrutura esférica irradiada). Comparamos nossos resultados com estudos experimentais equivalentes [2].

O Programa TRIM

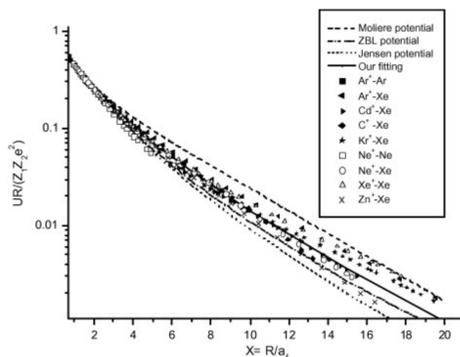
O TRIM calcula as cascatas de colisão e os defeitos que elas geram na matriz, mapeando vacâncias, substituições e intersticiais de cada átomo que se moveu. O programa utiliza os métodos de Aproximação de Colisão Binária (BCA) e Monte Carlo para realizar as simulações.

Diagrama do modelo BCA. Conhecendo os parâmetros iniciais e o potencial interatômico, pode-se definir todos os parâmetros finais da colisão.



Nas simulações a interação interatômica é governada por um potencial coulombiano exclusivamente repulsivo e blindado, o Potencial ZBL. Ao lado vemos o ajuste do potencial para diversos pares de átomos interagentes [3].

O TRIM não considera a estrutura cristalina dos alvos, com isso, todo são amorfos (como um gás) mas com densidade e concentração do material sólido.



Referências

[1] Rizza, G., et al., *Phys. Rev. B*, **76**, 245414 (2007)

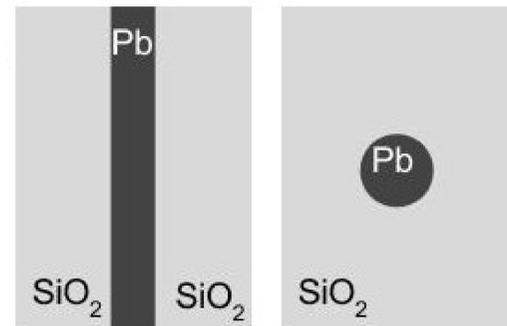
[2] Luce, F.P., Tese de Doutorado, UFRGS (2012)

[3] Zinoviev A.N., "Interaction Potential for Modeling of Ion-Surface Scattering, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*", Volume 269, issue 9, (2011)

[4] Ramjauny, Y., Tese de Doutorado, Ecole Polytechnique, Palaiseau (2010)

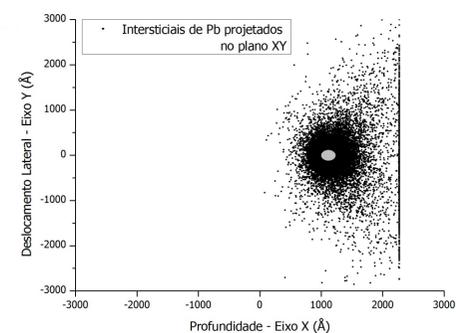
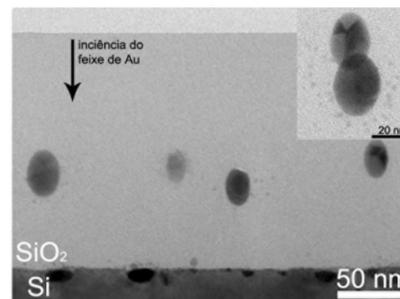
TARDISS

A versão original do TRIM só permite simular sistemas de multicamadas com interfaces planas. Portanto, visando estudar NPs, exigiu-se modificações no programa. Agora é possível estudar NPs embebidas em matrizes de composição AB_2 . Na imagem à direita temos duas representações de possíveis simulações: a primeira é utilizando o TRIM e a segunda com a TARDISS.

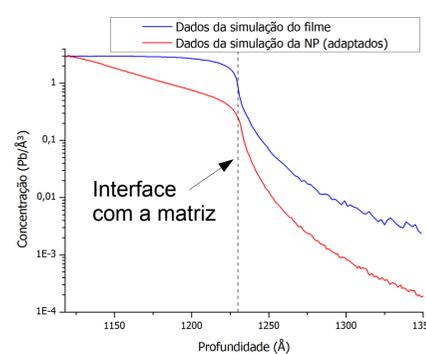
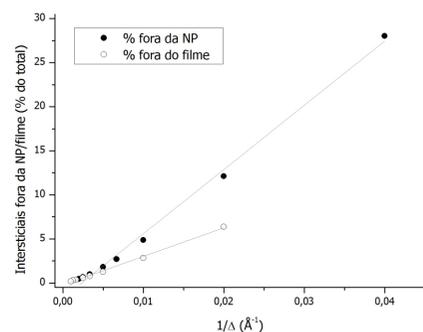


Resultados

Vemos, abaixo, o resultado experimental (à esquerda) de uma NP de Pb embebida em SiO_2 irradiada com Au (4 MeV) e seu alongamento na direção de incidência do feixe. À direita há a simulação deste sistema (utilizando a TARDISS), onde há indícios da deformação da NP irradiada.



Ao lado vemos uma comparação entre o TRIM e a TARDISS, que mostra a porcentagem de intersticiais ejetados do filme e da NP (para cada simulação respectiva). O Δ representa a espessura do filme ou raio da NP. O número de intersticiais fora da NP cresce ~120% mais rápido do que fora do filme (com a diminuição de seus tamanhos).



Pode-se, também, estudar o perfil de soluto adicionado à matriz devido a irradiação, ou seja, a concentração de intersticiais fora da NP e comparar os resultados para simulações com o TRIM e TARDISS. Para o gráfico ao lado os dados obtidos da TARDISS foram re-escalados para podermos comparar melhor o perfil de distribuição de intersticiais.

Vemos que o perfil de concentração de intersticiais ejetados da NP é muito diferente daquele relacionado ao filme. Podemos usar estas simulações para estimar a concentração adicional de soluto necessária para a nucleação de NPs satélites no entorno da NP irradiada. Para um satélite a ~100 Å da interface NP-matriz estima-se uma adição de soluto 7 ordens de grandeza menor para a irradiação da NP (simulada com a TARDISS) em relação ao filme (simulado com o TRIM).

Conclusão

Notoriamente as duas simulações (TRIM e TARDISS) apresentam resultados muito diferentes em sistemas equivalentes, o que indica que as simulações feitas na literatura [4], que aproximam NPs por filmes finos e utilizam o TRIM, não são uma boa representação do sistema físico real encontrado em laboratório. Há, por exemplo, a superestimação da concentração de soluto ejetado da NP por diversas ordens de grandeza. Outro resultado interessante é que uma simulação puramente balística já demonstra que a NP se alonga na direção de irradiação, sem ser necessário estudar a termodinâmica do sistema.