

EFEITOS PROVOCADOS PELA RADIAÇÃO IONIZANTE NO GRAFITE PIROLÍTICO

Kauê Manoel da Costa¹, Luís Humberto Avanzi², Marcilei Aparecida Guazzelli³

^{1,3} Departamento de Física, Centro Universitário FEI

² Departamento de Física, Centro Universitário FEI

kaumanoel1997@hotmail.com, marcilei@fei.edu.br

Resumo: Este projeto de pesquisa, propõe a caracterização de amostras finas de grafite Pírolítico Altamente Orientado (HOPG – Highly Oriented Pyrolytic Graphite), observando as variações estruturais que estão relacionadas com a condutividade térmica do material e sondar o tempo de vida útil do material.

1. Introdução

Os neutrinos são partículas com massa muito pequena, com difícil detecção, pouca interação e, fazem parte da inúmeras partículas que estão presentes na natureza. Com objetivo de sondar sua natureza e determinar sua massa efetiva, o projeto NUMEM (Nuclear Matrix Elements in Neutrinoless Double Beta Decay) - coordenado pelo professor Francesco Cappuzzello no laboratório de Catania localizado na Itália - realiza uma investigação experimental por meio de resposta nuclear a partir das reações de troca de carga dupla (Duble Charge Exchange – DCE) para todos os isótopos explorados por estudos atuais e futuros provenientes do decaimento dupla beta $0\nu\beta\beta$ (Double Beta Decay). [1,2]

Para este estudo experimental, há dois modelos teóricos, um descrito por Ettore Majorana e outro pelo físico Paul Dirac, ambos concorrem para justificar os resultados e espera-se validar um destes modelos. Importante destacar que este é um caso de física que está entre as pesquisas mais importantes para a ciência “além do Modelo Padrão” e pode guiar o caminho em direção a uma Grande Teoria Unificada de interações fundamentais e desvendar a fonte da assimetria matéria-antimatéria observada no Universo. [1,2]

Para a realização experimental, o projeto conta com o uso de um substrato acoplado ao alvo onde corre as reações nucleares. Um dos desafios experimentais associado ao estudo está no fato de que o alvo está exposto diretamente a um fluxo de íons provenientes do feixe que ao penetrá-lo durante toda a sua espessura provocará um aumento excessivo de temperatura podendo inviabilizá-lo. Por essa razão, escolheu-se o Grafite Pírolítico Altamente Orientado como material de substrato, uma vez que este apresenta alta condutividade térmica e ficará acoplado junto ao alvo com a finalidade de dissipar a grande quantidade de calor presente. [1,2,3]

Os átomos na rede cristalina do Grafite Pírolítico Altamente Orientado se organizam formando uma estrutura cristalina com célula unitária na forma hexagonal. Sua estrutura apresenta alto grau de cristalinidade e ordenação, além disso o material apresenta anisotropia, no qual suas propriedades físicas apresentam resultados distintos dependendo da direção do plano que for medida. [4]

Assim, o objetivo deste trabalho é investigar as propriedades estruturais do grafite pírolítico, utilizando simulação computacional com o software PACE [5] somado ao programa SRIM/TRIM [6] visando simular condições que são de interesse do projeto NUMEM e encontrar o tempo de vida útil do material.

2. Materiais e Método

2.1. Simulação software PACE

O software emprega uma versão modificada do JULIAN (código de evaporação Hillman-Eyal), no qual utiliza o momento angular de acoplamento ao código de Monte-Carlo[5]. Assim, é possível realizar simulações de irradiação com nêutrons, retirar valores e contagens de partículas residuais de produtos da reação do nêutron com qualquer partícula, no nosso caso, sendo as partículas de carbono presentes na estrutura do HOPG.

2.2 Simulação com software SRIM/TRIM

O uso do software SRIM/TRIM permite calcular a integral de espalhamento que um íon sofre ao colidir com meio material, podendo atravessar este meio ou ser freado. Sendo este fenômeno de natureza estocástica, o software utiliza método numérico de Monte Carlo para resolver a equação 01 que foi desenvolvida com o uso de tabulações e parametrizações semi-empíricas de Northcliff e Schilling e de Ziegler, Bismark e littmark, que permitem descrever valores médios de transferência de energia que a partícula deixa ao atravessar o meio. [6]

$$\theta = \pi - 2 \int_{x_0}^{\infty} \frac{b' dx}{x^2 \left[1 - \frac{\phi(x)}{x\epsilon} - \frac{b'^2}{x^2} \right]^{1/2}} \quad (01)$$

onde θ é o ângulo de espalhamento, x é o espaço percorrido pelo íon, ϵ é a energia reduzida de Lindhard e b' é parâmetro de impacto.

O software calcula a energia transferida proveniente do feixe de íons incidentes para os átomos do alvo e energia absorvida por átomos alvo bem como as vacâncias geradas pelas colisões realizadas pelos íons ou pelos recuo (deslocamento do átomo da rede cristalina da sua posição original) dos átomos da rede. Com isso, é possível realizar a simulações que são de interesse do projeto NUMEM.

3. RESULTADOS

Os parâmetros utilizados para conseguir estimar os danos e possíveis produtos de reação da interação do nêutron com o HOPG foram: Energia de bombardeio: 14.00 (MeV); energia do centro de massa: 12.92(Mev);

energia de excitação do núcleo composto: 17.869 (Mev); Valor Q da reação: 4.946(Mev); Energia de recuo do núcleo composto: 1.077(Mev); Velocidade de recuo do núcleo composto: 4.001e-1 (cm/ns); Velocidade do núcleo composta :1.334e-02; Velocidade do feixe: 5.201e+00(m/ns); Velocidade do feixe : 1.734e-01. A partir dos parâmetros, os resultados da simulação nos deram a seguinte tabela com o número de eventos de cada um dos elementos gerados com a reação (Tabela 01).

Tabela 1 - Resultados da Simulação do PACE

Z	N	A	Eventos	Probabilidade da reação
6	7	¹³ C	13	1,30%
6	6	¹² C	590	59%
4	5	⁹ Be	397	39,70%
TOTAL			1000	100%

Após o resultado obtido na simulação do PACE, foi possível observar que o carbono 12 e o berílio apresentaram maior porcentagem de partículas residuais de produtos da reação do nêutron e, portanto, justificam uma segunda simulação (TRIM) para avaliar os danos que esses átomos provocam na estrutura do grafite pirolítico

Simulando o Carbono 12 com 2Mev de energia, obtém-se o gráfico presente na Figura 01.

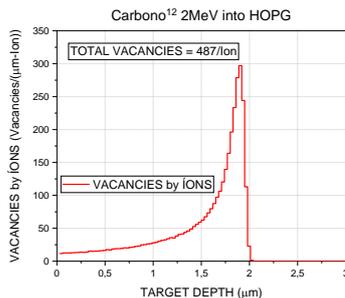


Figura 01: – Penetração do carbono 12 no grafite pirolítico.
Fonte: autor.

Na Figura 01 pode-se notar que a quantidade de dano gerado pelo Carbono é de 487 vacâncias por íon que atravessam o material, ou neste caso, que são interrompidos em aproximadamente 2 micrometros de profundidade do alvo. Considerando que na simulação do PACE foram gerados 153 átomos de carbono e, portanto, 153 íons de carbono que interagiriam com o HOPG, é possível chegar a um valor de 74511 vacâncias de carbono em 1000 eventos de nêutrons no Grafite.

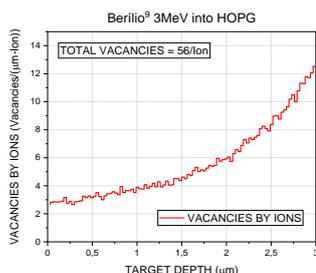


Figura 02: – Penetração do berílio no grafite pirolítico.
Fonte: autor.

O Berílio, observando os resultados no gráfico da Figura 02, nota-se que ele ultrapassa os 3 micrometros de carbono da simulação, fazendo com que o seja gerado menos dano, já que parte da energia do feixe não é transmitida dentro do substrato. Segundo os resultados do PACE, dos 1000 eventos simulados, 69 resultam na composição de Berílio como produto e, fazendo a correlação com a simulação do TRIM, chega-se no valor de 3864 vacâncias de Berílio.

As simulações comprovam que uma grande quantidade de defeitos (vacâncias) na rede cristalina do material são formadas após ser irradiada. Isso interfere significativamente na condutividade térmica do material, pois segundo a literatura [7], o HOPG realiza a transferência de calor por meio dos fônons e este está relacionado com vibração e a geometria da rede e após uma pequena quantidade de defeitos a condutividade térmica diminui exponencialmente.

4. Conclusões

Neste trabalho foi possível observar através de simulações, que as interações entre o nêutron e os átomos do HOPG geraram, através de reações, novos elementos, no qual constatou-se que estes ao atravessar a estrutura do grafite pirolítico gerou vacâncias por íon, resultados em danos que afetam a estrutura do material e diminuiu a condutividade térmica do mesmo.

5. Referências

- [1] Cappuzzello, F., Agodi, C., Cavallaro, M. et al. The NUMEN project: NUClear Matrix Elements for Neutrinoless. Acesso: 23/09/2021.
- [2] double beta decay, Eur. Phys. J. A (2018) 54: 72.
- [3] C. Agodi, et al., Determining the Nuclear Matrix Elements of Neutrinoless Double Beta Decays by Heavy-Ion Double Charge Exchange Reactions. Acesso: 25/09/2021.
- [4] Pinna, F et. al. Conference on Neutrino and Nuclear Physics (CNNP2017) IOP Publishing IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 1056 (2018) 012046; Acesso: 25/09/2021.
- [5] HOPG. Disponível em: <<http://nanoprobe.aist-ni.com/apps/HOPG%20info.htm>>. Acesso: 30/09/2021.
- [6] PACE 4: GUI evaporation code (Win, macOS, Linux). Disponível em: <<https://lise.nsl.msu.edu/pace4.html>>. Acesso: 01/04/2022
- [7] Aguiar, Vitor. et al. Instrumentação nuclear e efeitos de radiação em dispositivos eletrônicos, *XX Escola de verão Jorge André Swieca de Física Nuclear experimental*, p.254-257,2018. Acesso: 30/09/2021.
- [8] Baladim, Alexander A. *Thermal Properties of Graphene, Carbon Nanotubes and Nanostructured Carbon Materials*. 2011. University of California. Acesso: 30/9/2021.

Agradecimentos

Ao Centro Universitário FEI, a Universidade de São Paulo, Projeto INCT e CNPQ pelos laboratórios e equipamentos para realização de medidas.

*Aluno de IC do Centro Universitário FEI. Projeto com vigência de 09/21 a 08/22.