

Simulação dos efeitos da interação de íons com Grafite Pirolítico Altamente Orientado

Matheus Dos Santos Guerra¹, Marcilei Aparecida Guazzelli²

^{1,2} Centro Universitário FEI

matheus.santos.guerra@gmail.com marcilei@fei.edu.br

Resumo: Esse projeto de pesquisa tem como objetivo estudar e caracterizar o grafite pirolítico altamente orientado, expondo-a a diversos íons e fontes de energia, a fim de simular os cenários para os problemas identificados no alvo/substrato. Para isso, este estudo baseia-se nos resultados encontrados na literatura para HOPG, bem como em simulações utilizando o software SRIM/TRIM para identificar as lacunas causadas pelo feixe no material, enquanto tenta alterar as configurações relevantes se a funcionalidade tiver sido alterada.

1. Introdução

O HOPG é uma empilhagem de camadas de grafeno com uma leve desorientação entre elas. Um dos desafios experimentais associados ao estudo é o fato de que o alvo está diretamente exposto a um fluxo de íons do feixe, o qual, ao penetrar ao longo de sua espessura, causará um aumento excessivo de temperatura que pode torná-lo inviável. Por esta razão, o Grafite Pirolítico Altamente Orientado (HOPG) foi escolhido como material de substrato, uma vez que apresenta alta condutividade térmica e será acoplado ao alvo com o propósito de dissipar a grande quantidade de calor gerada.

No projeto NUMEN, o grafite pirolítico é utilizado como substrato para o material-alvo das intensas reações nucleares que ocorrerão. Como consequência dessas reações nucleares, uma grande quantidade de calor é produzida, e o grafite pirolítico é responsável pela dissipação desse calor. Os resultados do projeto NUMEN dependem diretamente da integridade das propriedades físicas, especificamente das propriedades térmicas e mecânicas, do grafite pirolítico.

Devido a enorme importância do substrato de grafite pirolítico e a necessidade de que suas propriedades não sejam alteradas de forma significativa, um estudo detalhado do comportamento deste material quando exposto a feixe de íons e de outras fontes de radiação é importante para verificar se ele é de fato um material adequado como dissipador térmico. Este estudo é muito importante para a continuação da utilização do grafite pirolítico como substrato para os alvos a serem utilizados no projeto NUMEN, e faz parte do desenvolvimento do projeto UNIVERSAL “Efeitos de irradiação por íons pesados em Grafite Pirolítico Altamente Orientado”.

2. Metodologia

Para o presente estudo, procurou-se primeiro estudar as características e propriedades do Grafite Pirolítico altamente orientado, compreendendo a alta cristalinidade do material e as ligações químicas que compõe o material. Em seguida, utilizou-se a simulação do

software SRIM/TRIM para avaliar as vacâncias que feixe íons causa ao penetrar material além de realizar comparação com os resultados encontrados na literatura.

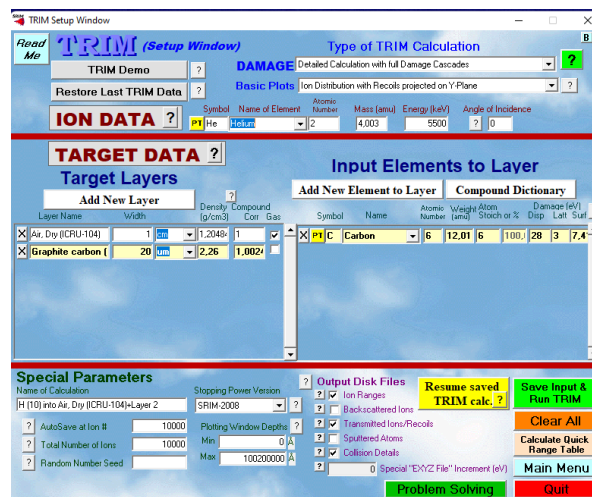


Figura 1 – Menu principal do software SRIM/TRIM

Utilizamos o programa TRIM (SRIM) para simular a produção de vacâncias no HOPG sob condições reais de irradiação. O feixe de íons atravessa facilmente todo o sistema-alvo, produzindo vacâncias ao longo de toda a sua extensão. O TRIM calcula a desaceleração e o alcance dos íons na matéria usando um tratamento quântico das colisões íon-átomo. Ele aceita alvos complexos compostos por materiais compostos e calculará tanto a distribuição final dos íons quanto todos os fenômenos cinéticos associados à perda de energia dos íons: danos ao alvo, ionização e produção de fônons, utilizando as densidades e energias de ligação para as simulações.

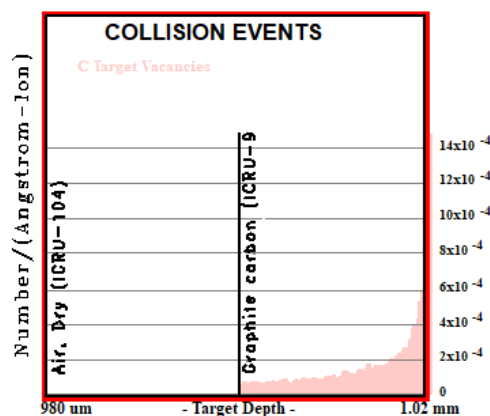


Figura 2 – Vacâncias geradas pelo SRIM/TRIM

3. Resultados

Foi possível fazer algumas análises comparando as simulações obtidas pelo SRIM/TRIM, gerando gráficos pelo Origin.

Como algumas das simulações, tem-se os danos causados pela variação na energia de irradiação alfa, de 2 MeV a 10 MeV, no HOPG, atravessando uma camada de 1 μm de ar seco.

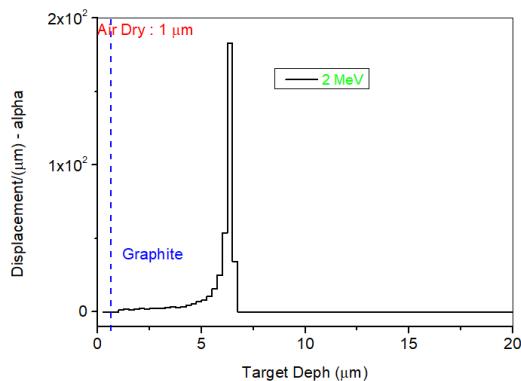


Figura 3 – Danos causados na energia de irradiação alfa de 2 MeV

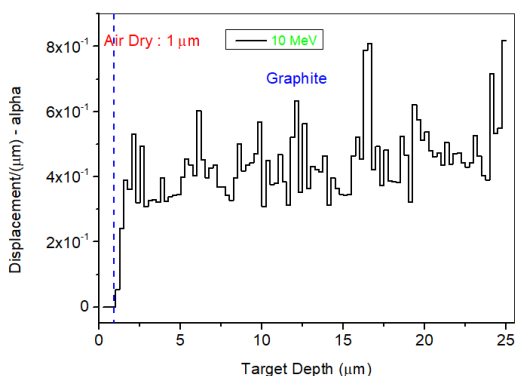


Figura 4 – Danos causados na energia de irradiação alfa de 10 MeV

Foram obtidos também os efeitos da variação na energia irradiada de 30 MeV a 60 MeV, ao substituir íons alfa por íons de cloro, no HOPG, atravessando uma camada de 1 μm de ar seco.

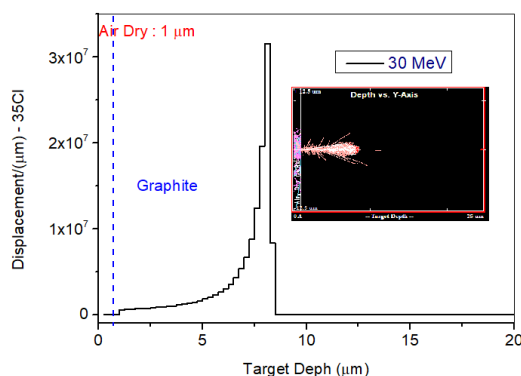


Figura 5 – Efeitos na energia de irradiação de íons de cloro de 30 MeV.

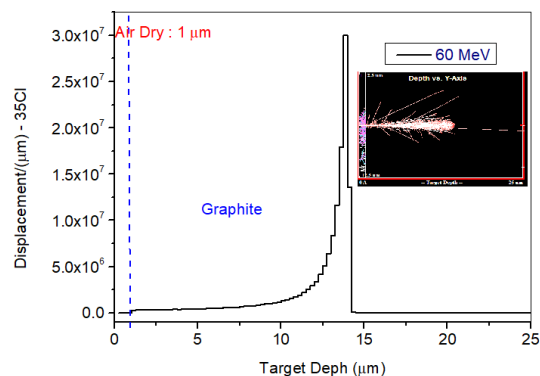


Figura 6 – Efeitos na energia de irradiação de íons de cloro de 60 MeV.

4. Conclusões

As simulações realizadas utilizando o software SRIM/TRIM ilustram a deposição de energia causada pelos íons do feixe à medida que atravessam toda a espessura tanto do material-alvo (HOPG) quanto do substrato subsequente. Isso resulta na criação de vacâncias devido ao poder de parada nuclear em cada simulação, levando à perda de energia dos íons incidentes e sua transferência para os átomos tanto do alvo quanto do substrato, aumentando assim os defeitos.

5. Referências

- [1] Cappuzzello, F., Agodi, C., Cavallaro, M. et al. The NUMEN project: Nuclear Matrix Elements for Neutrinoless double beta decay, Eur. Phys. J. A (2018) 54: 72.
- [2] C. Agodi, et al., Determining the Nuclear Matrix Elements of Neutrinoless Double Beta Decays by Heavy-Ion Double Charge Exchange Reactions.
- [3] AVANZI, L.H.; AGUIAR, V.A.P.; COSTA, K.M.; SANTARELLI, T.O.; Medina, N.H.; Oliveira, J.R.B.; CAPPUZZELLO, F.; IAZZI, F.; CAPIROSSI, V.; PINNA, F.; CAVALLARO, M.; GUZZELLI, M.A., Using TRIM-SRIM code simulations to determine defect density produced in HOPG irradiated with high energy heavy ions. JOURNAL OF PHYSICS. CONFERENCE SERIES (PRINT), v.2340, p.012002 - , 2022

Agradecimentos

Agradecimento ao Centro Universitário FEI; FAPESP: 07/04663-3; INCT_FNA: Proc. 464898/2014-5; CNPq: 301576/2022-0