

Simulação de passagem de íons em materiais cristalinos

Prof. Dr. Pedro Augusto Franco Pinheiro Moreira (UFScar)

Íons viajando através de sólidos deixam uma trilha de modificações estruturais ao longo da sua trajetória. Atualmente, o controle dessas modificações permitem diversas aplicações práticas como dopagem de materiais, desenvolvimento de nano-membranas para filtragem, métodos de datação, radioterapia por partículas, confecções de materiais para uso em ambientes radioativos e outros. O processo de alterações estruturais é localizado espacialmente e temporalmente (da ordem de micrometros e menor que microsegundos), dificultando medidas experimentais. Simulações por Dinâmica Molecular podem ajudar a preencher esse vazio de informações, permitindo entender as interações entre o íon e o material.

Para íons rápidos, a perda de energia do íon para o material aconteceria numa sequência de eventos predominando uma dinâmica eletrônica, seguida de um estágio de acoplamento elétron-fónon e, finalmente, uma dinâmica atômica. Os efeitos da dinâmica eletrônica e o estágio de acoplamento poderiam ser descritos por um aquecimento vertiginoso e localizado da rede cristalina do material, que criaria uma região amorfizada, chamada traço de íon. Esse aquecimento pode ser modelado por thermal spikes e usados em Dinâmicas Moleculares. Já íons mais lentos perdem sua energia para rede do material através de colisões elásticas, que são descritas por cascatas de colisões e que também podem ser simuladas. Esses dois tipos de simulação, que serão mostradas no seminário, podem trazer informações relevantes para as diversas aplicações citadas.