

Aplicações de feixes de Íons com Baixa Energia (~MeV) em nanotecnologia ou materiais quânticos

Março, 2022

Demanda: Docente para realizar pesquisa experimental na área de análise e modificação de materiais para nanotecnologia e materiais com aplicações em computação quântica ou sensores quânticos, com engajamento na atualização de instrumentação visando a manutenção do protagonismo recente do IFUSP na área de feixes iônicos e materiais.

Justificativa

O IFUSP, através do Laboratório de Análises de Materiais com Feixes Iônicos (LAMFI), vem exercendo uma posição de liderança mundial na área de análise de materiais com feixes iônicos. Os procedimentos de análise aqui desenvolvidos vêm sendo adotados em muitos laboratórios semelhantes ao LAMFI pelo mundo. A Figura 1 mostra o número de usuários do programa MultiSIMNRA, desenvolvido no IFUSP [1], nos países pelo mundo. Essa grande aceitação tem propiciado colaborações importantes com outras instituições, como a Iowa State University e o Max-Planck-Institut for Plasmaphysiks, e mais recentemente, Jülich Forschungszentrum, Saclay Université, Université de Namur.

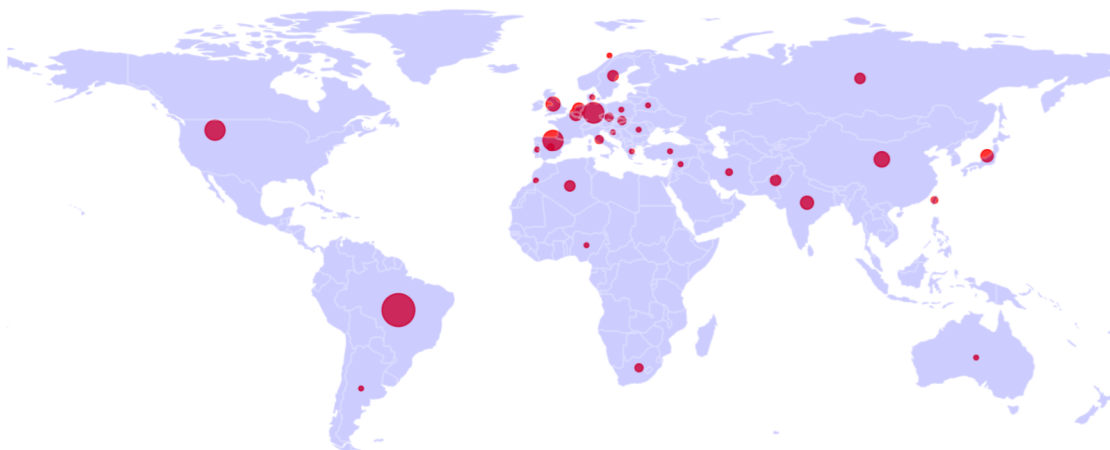


Figura 1. Uso do Programa MultiSIMNRA no mundo em 2022. Os discos foram centralizados no país. O diâmetro dos discos indica o número de usuários do programa.

O programa MultiSIMNRA é uma potente e reconhecida ferramenta para análise autoconsistente de espectros RBS, NRA, ERDA e PIXE, simplificando sobremaneira a análise de materiais, filmes finos ou nanoestruturados com resultados mais precisos e abrangentes. O programa MultiSIMNRA e seu concorrente NDF [2] inauguraram uma nova era na análise de materiais usando métodos de feixes iônicos (Ion beam Analysis em inglês) anteriormente limitadas pelo enorme esforço humano necessário para a correta

interpretação dos resultados analíticos. Em decorrência, docentes do IFUSP lideram a criação de uma rede de colaboração internacional para o desenvolvimento de métodos baseados em inteligência artificial para o processamento de dados de experimentos nucleares usados na análises de materiais.

Acompanhando a tendência mundial, a análise de materiais passa a ser usada em mapeamentos elementares em que uma amostra gera milhares de espectros. O controle de qualidade, foco, sensibilidade e o rápido e preciso processamento dos espectros gerados é essencial para a utilidade prática desses métodos. De nada adianta obter um mapeamento em alguns dias de análise e demorar meses para a correta interpretação e tratamento dos espectros. Em 2018 implementamos no LAMFI sistema para análise por IBA e mapeamento de grandes amostras [3]. Amostras com até 60 cm de comprimento são mapeadas com resolução espacial de 0,5mm. Essas tecnologias, desenvolvidas com primazia no arranjo de feixe externo do LAMFI são inovadoras, vêm sendo replicadas em vários laboratórios internacionais.

O parque tecnológico para Análise de Materiais por Feixes Iônicos, disponível no IF foi construído durante as últimas décadas e a expertise alcançada na área permite aos pesquisadores a participação em diversas colaborações nacionais e internacionais, até liderando alguns aspectos nos temas estudados. Recentemente, usando o mesmo tipo de equipamentos, começaram a surgir trabalhos com pesquisas inovadoras relacionadas à nanotecnologia e materiais quânticos, como por exemplo estudos de nanoestruturas com feixes iônicos ou a implantação iônica determinística (qbits). Em um evento promovido pela IAEA, discutiu-se as aplicações nesta última área (<https://nucleus.iaea.org/sites/accelerators/QuantumTW/SitePages/Home.aspx>).

A contratação de um novo pesquisador, para atuar na área, visa explorar essas novas linhas de pesquisas e manter a primazia do IF na área. Várias abordagens existem ou são potencialmente promissoras: tais como micro feixes, MEV-SIMS, Maldi, Luminescência induzida com feixes iônicos e outros. O candidato deverá propor a extensão e desenvolvimento do arranjo experimental atual, explorando novas fronteiras e aplicações de feixes iônicos, assim como, potenciais aplicações.

Impacto da contratação no âmbito do Instituto de Física

A contratação de um pesquisador na área de Física Aplicada com aceleradores viabiliza a inserção do IF em novas áreas de pesquisa atuais relacionadas com nanotecnologia e aplicações quânticas [4]. O número de trabalhos científicos nesses temas tem crescido nos últimos anos demonstrando um interesse crescente da comunidade científica. Iniciar pesquisas nesses temas inovadores é fundamental para que o instituto se mantenha atualizado e competitivo, oferecendo possibilidades em áreas com interesse crescente na comunidade.

Um novo pesquisador deverá trazer pesquisas inovadoras e desenvolvimentos instrumentais além de eventualmente colaborar com a aplicação de métodos de feixes iônicos nos mais diversos campos do conhecimento, cumprindo assim uma das vertentes para as quais o LAMFI foi criado em 1992.

Finalmente e não menos importante, esse novo pesquisador deverá contribuir com a carga didática no IF, em particular trazendo a fronteira do conhecimento em feixes iônicos para modificação de materiais para a sala de aulas.

Relevância atual da área (nacional e internacionalmente)

A área de física aplicada com feixes de íons tem evoluído rapidamente, com novas formas de se processar espectros e novas aplicações, criando novas oportunidades de pesquisa e inovação.

O uso de redes neurais artificiais [5] têm possibilitado o processamento de dados de milhares de amostras no tempo de algumas horas, tornando a aplicação em estudos mais amplos de materiais uma realidade. Uma área que tem se beneficiado dessa inovação é a de estudo de materiais relevantes para reatores de fusão nuclear [5]. E com a recriação da rede nacional de fusão, o ambiente é propício para que o IFUSP tenha um protagonismo nesses estudos.

Com a implementação do fast-PIXE presentemente em desenvolvimento no LAMFI e o uso de suportes robóticos [3], [6], vêm tornando possível o mapeamento analítico de áreas cada vez maiores, viabilizando estudos inéditos. Suas aplicações vão desde os estudos de obras de arte, permitindo o mapeamento de quadros completos até na arqueometria e na climatologia em que fósseis ou espeleotemas são analisados buscando relacionar sua composição com processos físicos, climatológicos e químicos.

Aliando técnicas de análise multivariada e de aprendizado de máquina [8], o potencial de crescimento do número de estudos que adotam essas análises é enorme. Técnicas desenvolvidas no IFUSP para o processamento desse tipo de dados vêm sendo aplicadas com sucesso em outros conjuntos de dados em pesquisas de alta relevância [9]–[11].

É de se dar especial atenção às aplicações de aceleradores de baixa energia, como o do LAMFI, em nanotecnologia e materiais quânticos. Muitos desenvolvimentos importantes, tanto teóricos quanto experimentais, em implantação iônica determinística visam a produção de qbits para computadores quânticos de estado sólido. Também, a criação de vacâncias com implantação de nitrogênio para a criação de centros de cor em diamante (nitrogen vacancy color centers) é uma aplicação de feixes de íons em sensores quânticos de temperatura e campos magnéticos, bem como uma tecnologia para fontes de fótons únicos, com especial interesse para comunicação de sistemas quânticos.

Prognóstico de potenciais candidatos

No Brasil, existem alguns pólos de formação de recursos humanos na interface entre física nuclear e materiais. Candidatos formados nestes pólos tem perfil adequado à demanda. Uma lista de doutores conhecidos é apresentada a seguir. Todos em posições de pós-doutoramento no Brasil ou no exterior.

1. Cíntia Pires da Costa

2. Erich Leistenschneider
3. Flávio Matias da Silva
4. Felipe Selau
5. Gustavo Ferraz Trindade
6. Hellen Cristine Santos Zagatto
7. Juan Carlos Zamora Cardona
8. Paula Rangel Pestana Allegro
9. Pedro Herzilio Ottoni Viviani de Campos
10. Vitor Ângelo Aguiar

No exterior, candidatos formados na University of Surrey, Melbourne University e no Instituto Nazionale di Fisica Nucleare também têm perfil alinhado à proposta.

Viabilidade da execução de projetos na área

Como citado acima, o parque tecnológico disponível no instituto permite a continuidade das pesquisas já em andamento no IF bem como da realização de novos experimentos em trabalhos com pesquisas inovadoras relacionadas à nanotecnologia e materiais quânticos (nanoestruturas + materiais quânticos). A execução de experimentos nessas novas linhas de pesquisa poderá ser realizada com um investimento mínimo de material quando comparado com os valores dos equipamentos já disponíveis.

Além da infraestrutura disponível no IFUSP, possível de uso em colaboração, também é possível contar com a infraestrutura de caracterização e síntese de materiais do LNNano, em Campinas.

Equipe proponente

Manfredo H. Tabacniks, Prof. Titular, IFUSP

Márcia A. Rizzutto, Profa. Associada, IFUSP

Nemitala Added, Prof. Dr. IFUSP

Tiago Fiorini da Silva, Prof. Dr. IFUSP (atual Coordenador do LAMFI-USP)

Nilberto Heder Medina, Prof. Associado, IFUSP

Referências

- [1] T. F. Silva *et al.*, “MultiSIMNRA: A computational tool for self-consistent ion beam analysis using SIMNRA,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. At.*, vol. 371, pp. 86–89, Mar. 2016, doi: 10.1016/j.nimb.2015.10.038.
- [2] N. P. Barradas and C. Jeynes, “Advanced physics and algorithms in the IBA DataFurnace,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. At.*, vol. 266, no. 8, pp. 1875–1879, Apr. 2008, doi: 10.1016/j.nimb.2007.10.044.
- [3] T. F. Silva *et al.*, “Elemental mapping of large samples by external ion beam analysis with sub-millimeter resolution and its applications,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.*

- Sect. B Beam Interact. Mater. At.*, vol. 422, pp. 68–77, May 2018, doi: 10.1016/j.nimb.2018.03.006.
- [4] B. Keimer and J. E. Moore, “The physics of quantum materials,” *Nat. Phys.*, vol. 13, no. 11, Art. no. 11, Nov. 2017, doi: 10.1038/nphys4302.
- [5] R. da S. Guimarães *et al.*, “Processing of massive Rutherford Back-scattering Spectrometry data by artificial neural networks,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. At.*, vol. 493, pp. 28–34, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.nimb.2021.02.010.
- [6] C. P. Dhard *et al.*, “Erosion and deposition investigations on Wendelstein 7-X first wall components for the first operation phase in divertor configuration,” *Fusion Eng. Des.*, Dec. 2018, doi: 10.1016/j.fusengdes.2018.12.031.
- [7] I. B. Mihalić *et al.*, “Multivariate analysis of PIXE + XRF and PIXE spectral images,” *J. Anal. At. Spectrom.*, vol. 36, no. 3, pp. 654–667, 2021, doi: 10.1039/D0JA00529K.
- [8] T. F. Silva, G. F. Trindade, and M. A. Rizzutto, “Multivariate analysis applied to particle-induced X-ray emission mapping,” *X-Ray Spectrom.*, vol. 47, no. 5, pp. 372–381, Sep. 2018, doi: 10.1002/xrs.2953.
- [9] P. Mohapatra *et al.*, “Calcination does not remove all carbon from colloidal nanocrystal assemblies,” *Nat. Commun.*, vol. 8, no. 1, p. 2038, Dec. 2017, doi: 10.1038/s41467-017-02267-9.
- [10] S. Shaw *et al.*, “Building Materials from Colloidal Nanocrystal Assemblies: Molecular Control of Solid/Solid Interfaces in Nanostructured Tetragonal ZrO₂,” *Chem. Mater.*, vol. 29, no. 18, pp. 7888–7900, Sep. 2017, doi: 10.1021/acs.chemmater.7b02769.
- [11] K. Schlueter *et al.*, “Absence of a Crystal Direction Regime in which Sputtering Corresponds to Amorphous Material,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 125, no. 22, p. 225502, Nov. 2020, doi: 10.1103/PhysRevLett.125.225502.