

Neste projeto foram utilizados *quantum-dots* (nanopartículas de um material semiconductor) *core-shell* de CdSe/ZnS diluídos em uma solução de tolueno, comerciais da Evident Technologies. O objetivo é determinar a estrutura interna desse material (distribuição espacial dos elementos presentes na nanopartícula), para isso, foram utilizadas as seguintes técnicas para auxiliar a análise: RBS (*Rutherford Backscattering Spectrometry*), TEM (*Transmission Electronic Microscopy*), PIXE (*Particle Induced X-Ray Emission*) e, principalmente, a técnica MEIS (*Medium Energy Ion Scattering*), sendo esta mais indicada.

A técnica MEIS é uma técnica de análise de materiais por espalhamento de íons com uma alta resolução em energia (~120 eV para feixes com energia de 100 keV). Com ela, é possível fazer uma análise das superfícies cristalinas e materiais amorfos, determinando quantitativamente composições elementares, com resolução de profundidade menor do que 1 nm. Isso possibilita determinar distribuições de concentrações elementares dentro de nanopartículas.

A amostra utilizada vem diluída em uma solução líquida de tolueno, a uma concentração de 2,2 mg/mL. Os quantum dots são nanocristais de CdSe recobertos com uma casca de ZnS (formando uma estrutura núcleo-casca) e estabilizadas por uma substância chamada *trioctylphosphine oxide* (TOPO), contendo oxigênio, fósforo, hidrogênio e carbono. Uma pequena quantidade de CdSe/ZnS foi aplicada sobre uma superfície pequena de um cristal de silício e em seguida colocada em um spinner, para que as partículas pudessem se espalhar na superfície.

Através do TEM, obtemos aproximadamente o diâmetro da nanopartícula e também foi possível observar que os núcleos são praticamente esféricos. Pelo PIXE e RBS, analisamos as concentrações elementares totais na amostra e com o MEIS, foi possível a determinação das distribuições desses elementos no núcleo e na casca, com o auxílio do software *PowerMeis*. Pelo software, pode-se comparar o espectro teórico com o espectro experimental, para determinar as características da amostra como, por exemplo, estequiometria, tamanhos de nanopartículas e distribuição dos elementos em nanoestruturas.

Foram usados três perfis para a análise, para o espalhamento em 112°, 120° e 128°. Utilizando o *PowerMeis*, testou-se diversos modelos para as nanopartículas, buscando obter o aspecto mais semelhante com o espectro experimental. Primeiro foram analisados os modelos se baseando apenas em um ângulo de espalhamento. Após ter achado o melhor modelo, este foi analisado nos demais ângulos. Foi obtido dois modelos consistentes, um deles apresenta o núcleo estequiométrico, ou seja, apresenta as mesmas frações de Cádmio (50%) e Selênio (50%) e na casca, apresenta Cádmio (13,09%), Zinco (39,49%) e Enxofre (47,42%). O outro modelo apresenta o núcleo de Cádmio (60%) e Selênio (40%), a casca apresenta Cádmio (8,22%), Zinco (41,70%) e Enxofre (50,08%).

Esses dois modelos ajustam os dados experimentais. Portanto a conclusão é que, apesar do excesso de cádmio existente nos nanocristais, o núcleo é estequiométrico e a casca contém o cádmio excedente.

