



UNIVERSITATEA POLITEHNICA din BUCUREȘTI

Scoala doctorala de "Ingineria si Aplicatiile Laserilor si Acceleratorilor"

Teză de doctorat

**Simularea și proiectarea sursei de pozitroni ELI-NP
și a sistemului de pulsare al fasciculului de pozitroni
lenți**

Doru Dinescu

Coordonator
CS I Dr. Dimiter Balabanski

Autor
Doru Dinescu

București 2020

Cuprins

| | |
|---|-----------|
| Cuprins..... | 1 |
| 1. Introducere | 3 |
| 1.1. Proprietățile fundamentale ale pozitronului și pozitroniului..... | 5 |
| 2. Metode experimentale cu pozitroni. Spectroscopia de anihilare a pozitronilor..... | 6 |
| 2.1. Prezentare generală | 6 |
| 2.2. Surse de pozitroni..... | 6 |
| 2.3. Moderarea pozitronilor..... | 8 |
| 2.4. Transportul particulelor cu sarcina în câmpuri electromagnetice | 9 |
| 2.5. Doppler Broadening Spectroscopy | 9 |
| 2.6. Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy | 10 |
| 3. Sursa de pozitroni ELI-NP - ELIPS. Formarea și moderarea fasciculului de pozitroni..... | 11 |
| 3.1. Proiectarea laboratorului de spectroscopie cu pozitroni de la ELI-NP | 11 |
| 3.2. Sursa de pozitroni ELI-NP. Formarea fasciculului..... | 14 |
| 3.3. Optica liniei fasciculului de pozitroni. Focusarea și ghidarea. | 14 |
| 3.4. Măsurători cu spectroscopie de anihilare a pozitronilor pentru materiale de moderare. Rezultate experimentale..... | 15 |
| 3.4.1. PAS pe filme subțiri, epitaxiale, de GaN | 15 |
| 3.4.2. PAS pe folii de platină..... | 21 |
| 4. Proiectarea și simularea sistemului de pulsare pentru fasciculul de pozitroni de la ELI-NP..... | 25 |
| 4.1. Proiectarea sistemului de pulsare. Tehnica “bunching and chopping” | 25 |
| 4.1.1. “e ⁺ beam bunching” | 25 |
| 4.1.2. “e ⁺ beam chopping” | 26 |
| 4.1.3. Proiectarea sistemului de pulsare a fasciculului de e ⁺ de la ELI-NP | 26 |
| 4.2. Simulări privind performanța sistemului de pulsare. | 27 |
| 4.2.1. “Pre-buncher” | 27 |

1.1. Proprietățile fundamentale ale pozitronului și pozitroniului

| | |
|--|-----------|
| 4.2.2. “Chopper” | 27 |
| 4.2.3. “Main buncher” | 28 |
| 4.3. Proiectarea și simularea filtrului de energie pentru pozitronii retroimprastiați. ... | 29 |
| 4.3.1. Medii de simulare. Proiectarea sistemului..... | 29 |
| 4.3.2. Analiza și rezultatele datelor de simulare..... | 30 |
| Concluzii | 33 |
| Mulțumiri..... | 35 |
| Bibliografie | 36 |

Capitolul 1

1. Introducere

Tehnicile bazate pe pozitroni s-au dovedit de-a lungul anilor instrumente excelente pentru studiul tipului și concentrației defectelor din materialele noi [1–3]. În ultimele decenii a existat un impuls în fizica stării solide pentru dezvoltarea de noi materiale cu o gamă largă de aplicații [4]. Informațiile cu privire la tipul și concentrația defectelor din materialele noi au o mare importanță, deoarece proprietățile de interes pot fi afectate (*i. e.* defectele afectează proprietățile mecanice ale metalelor și ceramicii, conductivitatea în semiconductori, *etc.*), și o imagine completă a proprietăților fizice pot duce la noi descoperiri în domeniu.

Datorită sarcinii lor pozitive, pozitronii sunt prinși eficient în locuri cu densitate mică de electroni într-un material, cum ar fi defecte de volum deschis, dislocatii, *etc.* După implantarea lor, pozitronii se anihilează în cele din urmă cu un electron al materialului. Detectarea și analiza radiației de anihilare stau la baza spectroscopiei de anihilare a pozitronilor (PAS). Proprietățile radiației de anihilare depind de structura electronică din jurul locului de anihilare. Prin măsurarea duratei de viață a pozitronului de la implantarea sa până la eventuala anihilare a acestuia în material, se pot obține informații despre tipurile de defecte și concentrația lor relativă. Măsurând lățimea liniei de anihilare, pot fi obținute informații despre energia electronilor în jurul locului de anihilare.

Un studiu complet asupra unui material studiat necesită utilizarea unor tehnici complementare, deoarece nu există o metodă unică care să poată oferi o imagine completă asupra tuturor proprietăților fizice de interes. Ca particulă de probă a PAS, pozitronul poate pătrunde un material pe o distanță de la câțiva nanometri la câteva sute de nanometri, în funcție de energia sa și de densitatea materialului. Deoarece studiile PAS sunt nedistructive, ele reprezintă un instrument excelent pentru a fi utilizate împreună cu alte tehnici.

Metodele PAS convenționale folosesc emițători radioactivi β^+ ca surse de pozitroni. Deoarece pozitronii emiși de acest tip de surse au un spectru continuu de energie, cu cea mai mare energie în general până la sute de keV, acest lucru permite măsurarea numai a probelor cu grosimi mari. Datorită dezvoltărilor constante în domeniul materialelor moderne avansate, cum ar fi probele structurate în straturi sau filmele subțiri, s-au făcut progrese în domeniul spectroscopiei de anihilare a

1.1. Proprietățile fundamentale ale pozitronului și pozitroniului

pozitronilor, astfel încât să poată fi folosită pentru a studia aproape orice tip de material. Acest lucru a condus la crearea de fascicule de pozitroni monoenergetici cu energie variabilă. Adâncimea medie de implantare a pozitronului poate fi controlată de la suprafață la sute de nanometri în profunzime variind energia pozitronului, ceea ce permite profilarea în profunzime a probei studiate.

Un nou fascicul de pozitroni lenti este în construcție la Extreme Light Infrastructure - Nuclear Physics (ELI-NP), o facilitate în România. ELI-NP este unul dintre cei trei piloni ai proiectului ELI, care este un efort Pan-European menit să devină prima infrastructură internațională de cercetare cu laseri din lume [5]. ELI-NP este implementat pentru a servi ca centru de cercetare științifică pentru experimentele de fizică nucleară efectuate cu lasere de intensitate ridicată (2×10^{14} W) și \ sau cu fasciculul γ intens [6]. Ca parte a programului de cercetare ELI-NP, brațul cu energie redusă al fasciculului γ (până la 3.5 MeV) va fi utilizat pentru producția pozitronilor lenti. Fasciculul γ va avea o intensitate de $I_\gamma = 2.38 \times 10^{10} \text{ } \gamma \text{ s}^{-1}$ și inițial s-a considerat că va fi furnizat în “macro bunches” cu o rată de repetiție de 100 Hz. Fiecare “macro bunch” va consta din 32 de “micro bunches” de ~ 1 ps cu un interval de 16 ns între ei [7]. Majoritatea lucrărilor raportate în această teză se referă la un fascicul γ care prezintă caracteristicile descrise anterior. Secțiunea fasciculului γ la punctul de conversie va avea un diametru de 6.1 mm (FWHM). Simulările arată că se poate obține un fascicul de pozitroni lenti cu o intensitate $> 10^7 \text{ s}^{-1}$. În prima fază, cele trei spectrometre care vor fi disponibile pentru studii cu pozitroni sunt: Coincidence Doppler Broadening Spectroscopy (CDBS), Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy (PALS) și Positron induced Auger Electron Spectroscopy (PAES). Această teză prezintă câteva particularități ale laboratorului de spectroscopie cu pozitroni planificat la ELI-NP.

Primele două capitole descriu conceptele de bază necesare pentru a înțelege principiile PAS. În primul rând, sunt descrise informații despre proprietățile pozitronului, precum și despre „soarta” acestuia în materie. Capitolul doi se concentrează asupra particularităților fasciculelor de pozitroni lenti și atinge subiecte precum: surse de pozitroni, crearea unui fascicul monoenergetic de pozitroni lenti, transportul particulelor încărcate într-un câmp magnetic și detalii despre unele dintre metodele PAS.

Prima parte a celui de-al treilea capitol oferă o scurtă prezentare generală asupra laboratorului de spectroscopie cu pozitroni planificat la ELI-NP. A doua parte a capitolului se concentrează pe studiul PAS a două tipuri de materiale de moderare a pozitronilor. În primul rând, este prezentat un studiu menit să investigheze progresul realizat în fabricarea filmelor subțiri epitaxiale de GaN disponibile în comerț ca

posibil material pentru moderarea asistată pe camp electric a pozitronilor, realizat cu Doppler Broadening Spectroscopy (DBS). În al doilea rând, este prezentată caracterizarea structurii defectelor cu ajutorul DBS și PALS a foliilor Pt care vor fi utilizate ca material de conversie-moderare la ELI-NP.

Al patrulea capitol oferă informații despre simularea și proiectarea sistemului de pulsare a fasciculului de pozitroni ELI-NP. Sistemul este compus dintr-un “prebuncher”, “chopper”, “pre-accelerator”, “buncher”, “decelerator”, accelerator, și un tub de drift îndoit. Prima parte a capitolului prezintă performanțele simulate ale fiecărei părți a sistemului. A doua parte detaliază proiectarea și simularea filtrului de energie pentru pozitronii retroimprastiați.

1.1. Proprietățile fundamentale ale pozitronului și pozitroniului

Deoarece pozitronul este antiparticula electronului, acesta are aceeași masă de repaus, energie de repaus și spin, dar sarcina electrică opusă (vezi Table 1.1).

Table 1.1. Proprietățile pozitronului [8].

| | |
|--------------------------|--|
| Masă de repaus | $9.10938215(45) \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ |
| Energie de repaus | $0.510998910(13) \text{ MeV}/c^2$ |
| Sarcina | $+ 1.602176487(40) \cdot 10^{-19} \text{ C}$ |
| Spin | $1/2$ |

Rezultatul anihilării pozitronilor cu electroni este emisia a două sau trei cuante γ (sau mai multe cuante γ , dar cu “branching ratio” neglijabil). Modul de anihilare este dat de starea de spin a perechii $e^- - e^+$.

În afară de anihilare, electronul și pozitronul se pot lega pentru a forma un atom exotic asemănător hidrogenului numit pozitroniu (Ps). Masa pozitroniului este egală cu dublul masei electronului (1,022 MeV).

Starea de singlet, 1S_0 , este cunoscută sub numele de para-pozitroniu (p -Ps) și se caracterizează prin spini antiparaleli. În vid, p -Ps are o durată de viață de 0,125 ns și se descompune predominant cu două cuante γ .

Starea de triplet, 3S_1 , orto-pozitroniu (o -Ps), se caracterizează prin spini paraleli. În vid, o -Ps are o durată de viață de ~ 142 ns și se descompune predominant cu trei cuante γ .

Capitolul 2

2. Metode experimentale cu pozitroni. Spectroscopia de anihilare a pozitronilor.

2.1. Prezentare generală

Pozitronii, datorită sarcinii lor pozitive, sunt puternic respinși din nucleele ionice pozitive și prinși în interiorul unor defecte încărcate negativ sau neutre. Când un pozitron este implantat într-un material, acesta difuzează și în cele din urmă se anihilează cu un electron [1].

Metodele convenționale de anihilare a pozitronilor utilizează e^+ emisi direct de radioizotopi precum ^{22}Na și sunt potrivite pentru studierea materialelor cu grosimi mari. Pentru analiza straturilor de suprafață și a filmelor subțiri, sunt necesare fascicule de e^+ lenti. Toate metodele PAS se bazează pe detectarea cuantelor γ cu energii de 511 keV quanta mise după ce pozitronul anihilează cu un electron. Deoarece pozitronul este termalizat înainte de anihilare, energia sa cinetică este neglijabilă în comparație cu energia electronilor din solid. Astfel, variațiile în proprietățile radiației de anihilare pot furniza doar informații despre electron. O altă proprietate a pozitronului în materie este că prin măsurarea duratei sale de viață înainte de anihilare se obțin informații legate de densitatea de electroni din probă.

2.2. Surse de pozitroni

Surse radioactive

Fie pentru utilizarea metodelor convenționale PAS, fie pentru a crea fascicule mono-energetice de pozitroni lenti, majoritatea laboratoarelor din întreaga lume folosesc izotopi radioactivi ca mijloace pentru a genera particula de interes. Astfel de surse constau din radioizotopi care sunt emițători β^+ (vezi exemple în Table 2.1).

Cea mai potrivită sursă β^+ pentru producerea de pozitroni este radioizotopul ^{22}Na . Schema de descompunere a ^{22}Na este prezentată în Figure 2.1

Table 2.1. Proprietățile emițătorilor β^+ utilizați în mod comun. Datele sunt preluate din baza de date *NuDat* [9].

| β^+ source | $T_{1/2}$ | Intensity [%] | E_{average} [keV] | E_{end} [keV] |
|------------------|------------|---------------|----------------------------|------------------------|
| ^{22}Na | 2.6 years | 89.84 | 215.5 | 545.5 |
| ^{58}Co | 70.82 days | 14.96 | 201.3 | 475.2 |
| ^{64}Cu | 12.7 hours | 17.86 | 278.1 | 652.5 |

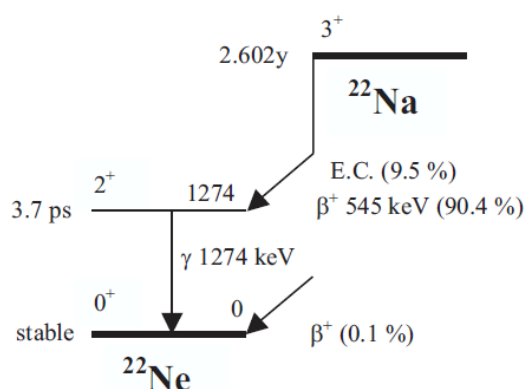


Figure 2.1. Schema de descompunere a ^{22}Na [10]. Această figură a fost adoptată din ref. [11].

Producerea de perechi

Când o cuanta γ intră într-un material solid, acesta interacționează cu un nucleu sau un electron și își transferă energia către mediu. Prin interacțiunea fotonilor γ cu materia pot avea loc în principal trei procese: efectul fotoelectric, împrăștiere Compton sau producerea de perechi.

Când energiile fotonilor γ depășesc pragul de cel puțin al energiei totale a masei de repaus a unei perechi de electroni pozitroni (1.022 MeV), începe să apară efectul de producere a perechii. În acest moment există trei concepte principale implementate pentru crearea fasciculelor de pozitroni prin mecanismul de producție a perechilor. Primul folosește radiația bremsstrahlung de la electronii extrem de energici ($\sim 10^1 - 10^2$ MeV) care provin dintr-un LINAC pentru a crea perechi electron - pozitron în materiale cu Z ridicat. Celelalte două metode sunt bazate pe reactoare nucleare.

2.3. Moderarea pozitronilor

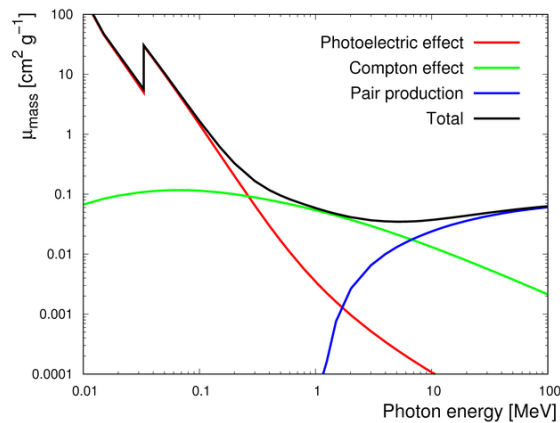


Figure 2.2. Variația coeficienților de atenuare a masei pentru efectul fotoelectric, efectul Compton și producția de perechi în funcție de energia fotonilor. Această figura a fost adoptată din ref. [12]

2.3. Moderarea pozitronilor

Toți pozitronii proveniți din sursele menționate în Capitolul 2.2 sunt emisi cu energii spectrale continue care acoperă o gamă largă. Pentru crearea de fascicule mono-energetice de pozitroni lenti există două opțiuni. Prima este să colimezi fasciculul de pozitroni și să păstrezi numai acei pozitroni într-un interval de energie îngust. Cea de-a doua metodă implică încetinirea unei fracții mari de pozitronilor, astfel încât majoritatea vor ajunge cu aproape aceeași energie scăzută. Acest proces se realizează de obicei prin interacțiunea unui fascicul energetic de pozitroni cu un material solid și se numește moderare.

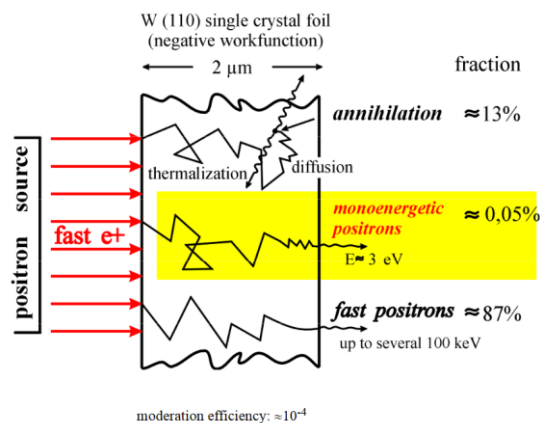


Figure 2.3. Procese care pot avea loc atunci când e^+ energetici intră într-un solid. Această figură a fost adoptată din [13].

La intrarea într-un solid, pozitronii rapid își pierd energia prin coliziuni inelastice (vezi Figure 2.3).

Distanța medie parcursă de un pozitron termalizat în timp ce difuzează într-un material se numește lungimea de difuzie, L_+ . Dacă materialul țintă are o funcție de lucru negativă pentru pozitroni, pozitronii termalizați într-un strat de grosime de ordinul L_+ pot fi reemisi în vid.

2.4. Transportul particulelor cu sarcina în câmpuri electromagnetice

Mișcarea unei particule cu sarcina într-un câmp magnetic este guvernată de schimbarea direcției de mișcare datorită prezenței câmpului electromagnetic.

Ecuțiile de mișcare ale unei particule cu sarcina sunt descrise de:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e \left[\mathbf{E} + \frac{\mathbf{u}}{c} \times \mathbf{B} \right], \quad 2.1$$

$$\frac{dE}{dt} = e\mathbf{u} \cdot \mathbf{E}, \quad 2.2$$

pentru o particulă cu sarcină e care se deplasează în câmpuri externe, \mathbf{E} și \mathbf{B} .

De obicei, această mișcare este descrisă folosind mecanica Lagrangiana cu coordonate generalizate $q_{i(t)}$ and $\dot{q}_{i(t)}$, în care acțiunea, A , este descrisă ca integrală a lui \mathcal{L} două perioade de timp, t_1 and t_2 :

$$A = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}[q_{i(t)}, \dot{q}_{i(t)}, t] dt. \quad 2.3$$

Pentru o particulă relativistă ($\beta = v/c$) Lagrangianul, \mathcal{L} , ia forma:

$$\mathcal{L} = m_0 c^2 \left(1 - \sqrt{1 - \beta^2} \right) + q(\vec{v} \cdot \vec{A} - \Phi), \quad 2.4$$

unde \vec{A} este potențialul vectorial magnetic, Φ este potențialul electric.

Mișcarea unei particule cu sarcina în câmpuri electromagnetice a fost studiată în detaliu în ultimele decenii, iar relatări detaliate cu privire la acest subiect pot fi găsite în multe cărți (vezi ref. [14–16]).

2.5. Doppler Broadening Spectroscopy

Așa cum se poate vedea în Figure 2.4, energia electronului anihilant duce la devieri de la anti-colinearitate și la un Doppler “shift”.

2.6. Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy

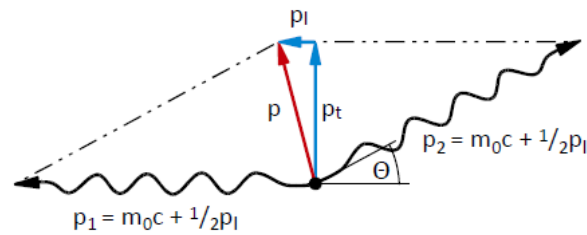


Figure 2.4. Abaterea de la colinearitate și schimbarea Doppler a cuantelor de anihilare induse de energia electronului anihilat. Această figura a fost adoptată din ref. [17].

Proiecția longitudinală a componentei a electronilor duce la o deplasare Doppler care este detectată ca o lărgire a peak-ului de anihilare. Prin urmare, lățimea este o măsură pentru distribuția energiei electronilor implicați în procesul de anihilare.

Zgomotul acestor măsurători poate fi redus dacă un detector HPGe este utilizat în coincidență cu un alt detector de raze gamma pentru a observa ambele raze gamma de anihilare. Curba de coincidență este luată prin detectarea celor doi fotoni în coincidență a căror energie satisface condiția din Eq. 2.5.

$$E_1 + E_2 = 2m_0c^2. \quad 2.5$$

2.6. Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy

Secțiunea eficace pentru anihilarea e^+ într-un material este descrisă de:

$$\sigma = \frac{\pi_0^2 c}{v_{e^+}}, \quad 2.6$$

unde v_{e^+} este viteza e^+ .

Durata de viață e^+ , τ_{e^+} , poate fi derivată din Eq. 2.6 după cum urmează:

$$\tau_{e^+} = \Gamma^{-1} = \frac{1}{\sigma v_{e^+} n_{e^-}} \propto \frac{1}{n_{e^-}}. \quad 2.7$$

Din Eq. 2.7 se poate deduce că durata de viață a e^+ într-un material este proporțională cu densitatea electronilor din jurul sitului de anihilare, n_{e^-} , și, de fapt, este invers proporțională cu n_{e^-} . Deoarece n_{e^-} în jurul defectelor este mai mic decât cel din rețeaua cristalină perfectă, durata de viață a e^+ crește pe măsură ce acestia se localizează în defecte.

Capitolul 3

3. Sursa de pozitroni ELI-NP - ELIPS. Formarea și moderarea fascicului de pozitroni

3.1. Proiectarea laboratorului de spectroscopie cu pozitroni de la ELI-NP

Ca parte a programului de cercetare ELI-NP, fasciculele γ cu energie scăzută vor fi utilizate pentru producția de e^+ . Astfel, un nou fascicul de pozitroni lenti, echipat la început cu trei sisteme spectroscopice, este dezvoltat la ELI-NP. Figure 3.1. prezintă planul general al laboratorului de spectroscopie cu pozitroni de la ELI-NP. Simulările arată că un fascicul de pozitroni lenti cu o intensitate de $\sim 2 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ poate fi obținut prin metode convenționale de moderare a e^+ . Intensitatea fascicului de e^+ poate fi mărită la $> 10^7 \text{ s}^{-1}$ dacă se aplică moderarea cu neon solid [18].

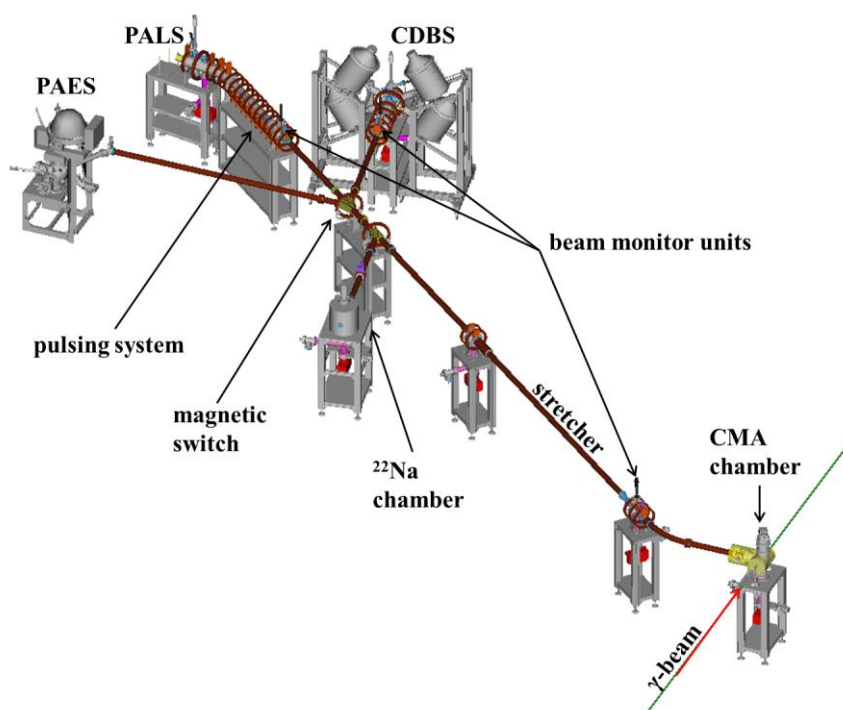


Figure 3.1. Planul general al laboratorului de spectroscopie cu pozitroni de la ELI-NP.

Fasciculul de e^+ lenti va fi transportat cu ajutorul unor câmpuri magnetice către oricare dintre cele trei sisteme spectroscopice prin linii de vid echipate cu

3.1. Proiectarea laboratorului de spectroscopie cu pozitroni de la ELI-NP

solenoidi și bobine. În prima fază, cele trei spectrometre care vor fi disponibile sunt CDBS, PALS și PAES..

Pentru funcționarea pe tot parcursul anului a laboratorului, o sursă radioactivă de ^{22}Na cu o activitate de maximum 50 mCi va fi de asemenea utilizată pentru producția de e^+ [19].

CDBS

Schema spectrometrului DBS \ CDBS este prezentată în Figure 3.2. Sistemul de detecție este format din 4 detectoare HPGe.

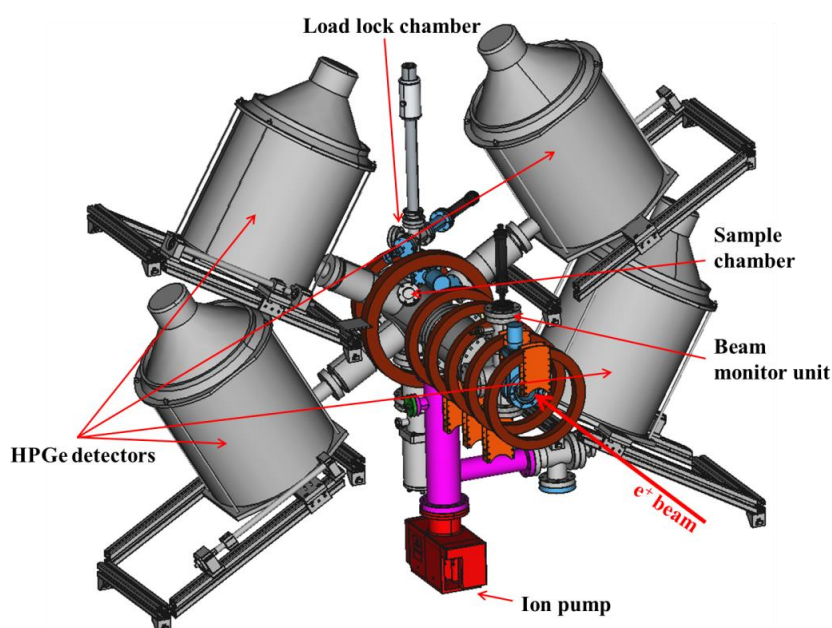


Figure 3.2. Planul general al spectrometrului Coincidence Doppler Broadening Spectrometer.

PALS

Schema spectrometrului PALS este prezentată în Figure 3.3. Sistemul de detectie constă dintr-un detector scintilator plasat în spatele probei.

A fost proiectat un sistem de pulsare, astfel încât semnalul de pornire al masuratorilor să fie preluat de la ceasul principal al electronicii “chopper-buncher”. Sistemul de pulsare este descris în detaliu în Capitolul 4.

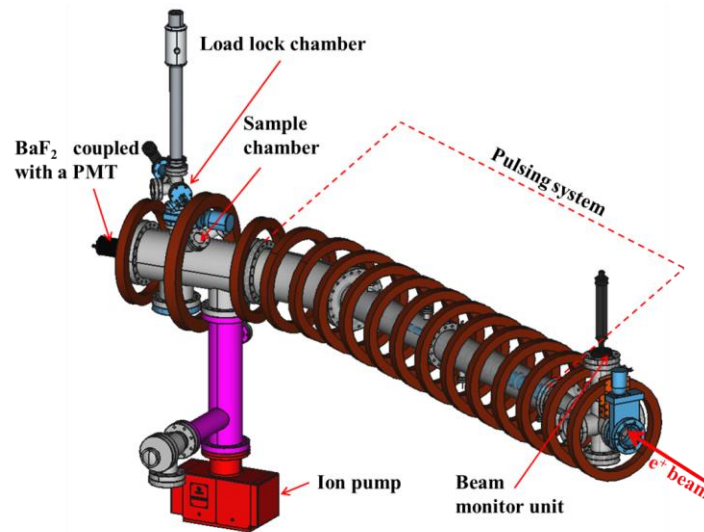


Figure 3.3. Planul general al spectrometrului Positron Annihilation Lifetime Spectrometer

PAES

Schema spectrometrului PAES este prezentată în Figure 3.4. Sistemul poate efectua „Positron induced Auger Electron Spectroscopy”, “Electron induced Auger Electron Spectroscopy” și “X-ray Photoelectron Spectroscopy”.

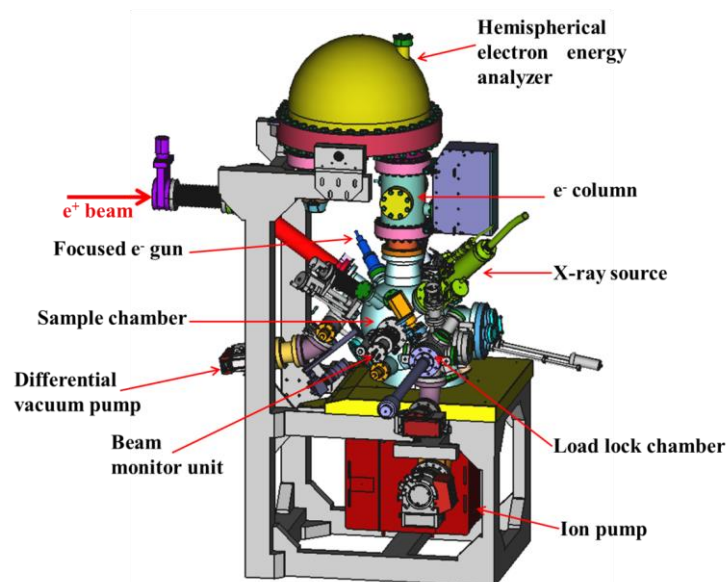


Figure 3.4. Planul general al spectrometrului Positron induced Auger Electron Spectrometer, prin amabilitatea SIGMA Surface Science™

3.2. Sursa de pozitroni ELI-NP. Formarea fasciculului.

Fasciculul de pozitroni se va forma în camera Converter Moderator Assembly (CMA) (vezi Figure 3.1). Aranjamentul final sursă-CMA va funcționa așa cum este prezentat în Figure 3.5.

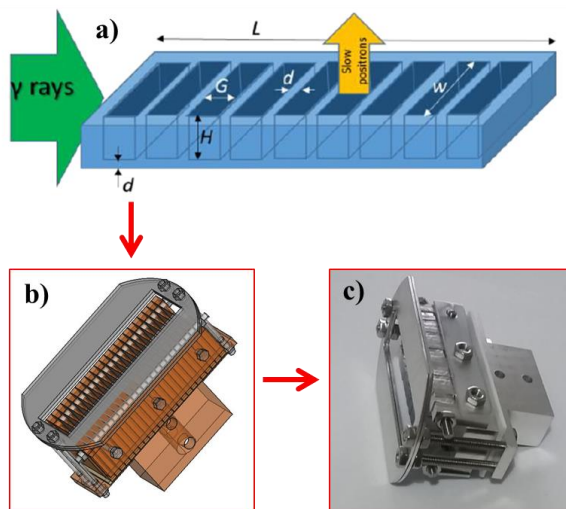


Figure 3.5. a) Geometria „Venetian blind” a sistemului convertor-moderator propus la ELI-NP [18]; b) Schema ansamblului convertor-moderator; c) Ansamblul convertor-moderator fabricat.

3.3. Optica liniei fasciculului de pozitroni. Focusarea și ghidarea.

După moderare, fasciculul de e^+ lenti creat, este extras în vid printr-un câmp electric redus generat între CMA și o plasă de W foarte transparentă ($> 95\%$ transmisie optică). Fasciculul focalizat intră în liniile de vid de transport, care sunt echipate cu solenoizi și bobine Helmholtz pentru a crea un câmp magnetic de ghidare.

Liniile de transport ale fasciculului sunt echipate cu trei unități de monitorizare a fasciculului (BMU) necesare pentru poziționarea corectă a fasciculului. Cele trei BMU-uri sunt poziționate în locații cheie de-a lungul liniilor de transport (vezi Figure 3.1).

Pe baza rezultatelor prezentate în capitolele 3.1, 3.2 și 3.3, au fost publicate două articole în **Journal of Physics: Conference Series**, in **Proceedings of the 14th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications** (vezi ref. [20]) si in **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment** (vezi ref. [21]).

3.4. Măsurători cu spectroscopie de anihilare a pozitronilor pentru materiale de moderare. Rezultate experimentale.

3.4.1. PAS pe filme subțiri, epitaxiale, de GaN

Datorită difuziei epitermale a pozitronilor și a largimii de bandă a GaN (3.4 eV), valoarea L_+ ar trebui să fie mai mare decât cea din semiconductorii tipici. Lungimea lungă de difuzie preconizată, faptul că GaN prezintă o funcție de lucru negativă pentru e^+ și tensiunea de străpungere mare (≈ 1 kV) sugerează că GaN ar putea fi un material adecvat pentru moderarea e^+ asistată de câmp electric [22,23]. Pe de altă parte, L_+ raportat în literatura de specialitate pentru GaN este de sub 60 nm [24].

Scopul acestui studiu este de a investiga prin PAS progresele realizate în fabricarea filmelor subțiri epitaxiale GaN disponibile comercial, crescute pe diferite substraturi și cu grosimi diferite. Filmele subțiri GaN studiate sunt produse de NTT Advanced Technology Corporation (Kanagawa, Japonia) (ref. [25]) (vezi Table 3.1.)

Table 3.1. Numele dat fiecărui set de probe împreună cu grosimea stratului respectiv de GaN și substratul de depunere.

| Numele probei | Grosimea stratului GaN (nm) | Substratul |
|---------------------------------------|-----------------------------|--------------------------------|
| GaN300/Si | 300 | Si |
| GaN700/Si | 700 | Si |
| GaN500/SiC | 500 | SiC |
| GaN300/Al ₂ O ₃ | 300 | Al ₂ O ₃ |

Măsurători DBS cu fascicul de pozitroni lenti

Măsurătorile au fost efectuate la Institute of High Energy Physics of the Chinese Academy of Sciences cu sistemul prezentat în Figure 3.6.

3.4. Măsurători cu spectroscopie de anihilare a pozitronilor pentru materiale de moderare.
Rezultate experimentale.

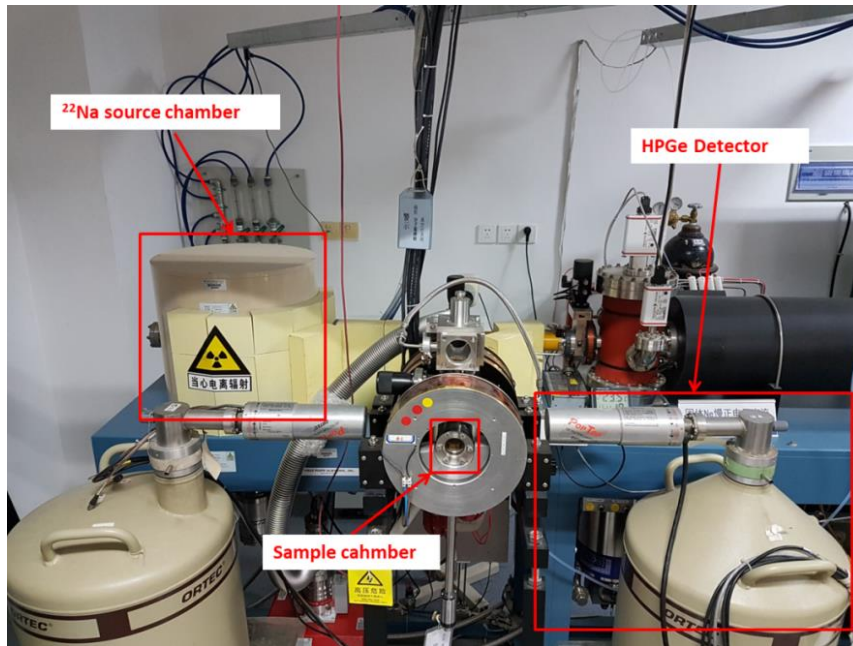


Figure 3.6. Slow e^+ beam DB Spectrometer setup at the Institute of High Energy Physics of the Chinese Academy of Sciences

Software-ul VEPFIT care rezolvă ecuația de difuzie a pozitronilor implantați a fost utilizat pentru a se analiza datele experimentale [26]. Ecuația transportului pozitronilor este dată de Eq. 3.1

$$D^+ \frac{d^2 c(z)}{dz^2} - \frac{d(v_d(z)c(z))}{dz} - k_t n_t(z)c(z) - \lambda_b c(z) + I_0 P(z, E_+) = 0, \quad 3.1$$

unde D^+ este coeficientul de difuzie a pozitronilor, $v_d(z) = \mu(z)$ este viteza de drift a pozitronului cu mobilitate μ și intensitatea câmpului electric (z), $n_t(z)$ este densitatea de defecte, k_t este rata constantă a pozitronii localizati in defecte, λ_b este rata de anihilare, I_0 este intensitatea pozitronilor implantați [27].

Măsurătorile DBS au fost efectuate luând în considerare numai informațiile furnizate de producător pentru probe. Într-o etapă ulterioară, după analizarea structurii tuturor probelor prin microscopie electronică de transmisie (TEM) la Universitatea Politehnica din București, a fost recunoscută existența unui strat tampon de AlN pentru toate probele [28,29].

Unul dintre parametrii care este derivat din analiza datelor este lungimea efectivă de difuzie a pozitronilor (L_{eff}) pentru fiecare strat. L_{eff} este limitat de defectele stratului și este descris de Eq. 3.2:

$$L_{\text{eff}} = \left[\frac{D^+}{k_t n_t + \lambda_b} \right]^{1/2}, \quad 3.2$$

Profilurile de adâncime $S(E_+)$ pentru GaN300/Si and GaN700/Si sunt prezentate în Figure 3.7. Scăderea inițială bruscă a S pentru $E_+ \lesssim 1$ keV se datorează pozitronilor epitermali anihilați. La $E_+ \gtrsim 1$ keV, se poate observa că S crește încet cu E_+ în zona filmului de GaN, iar în timp ce se apropie de stratul de AlN, începe o creștere mai puternică (pentru $E_+ \gtrsim 11$ keV) și tinde să atingă un nivel de saturație în substratul de Si (mai bine văzut în Figure 3.7b). Pe baza informațiilor TEM pentru probe a fost aplicat un model cu trei straturi (GaN, AlN și Si) pentru a se analiza parametrul experimental S cu ajutorul VEPFIT. Curbele analizelor preliminare sunt foarte apropiate de curbele prezentate în Figure 3.7. Cu toate acestea, cei mai buni parametri de analiza au arătat că $S_s \sim 0.445$ s-a dovedit a fi mai mic decât $S_{\text{GaN}} \sim 0.455$ (specific pozitronilor anihilați în filmul de GaN). Nu se formează Ps în adâncimea filmului de GaN, totuși, la suprafață, raportul de ramificare a arătat că 12% din pozitroni formează Ps [22].

Figure 3.8a și Figure 3.8b prezintă profilurile de adâncime $S(E_+)$ pentru GaN300/Al₂O₃ și GaN500/SiC. Pentru GaN300/Al₂O₃ la $E_+ \gtrsim 1$ keV se observă o scădere mai lentă a S cu E_+ (vezi Figure 3.8a). Deoarece Ps se formează numai la suprafața GaN și nu în interiorul filmului [22] iar auto-anihilarea formeii sale singlet, p -Ps, contribuie la ascuțirea liniei de anihilare lărgită Doppler, S_s este mai mare decât S_{GaN} în cea mai mare parte a filmului GaN. Acest lucru, împreună cu retro-difuzia pozitronilor termali la suprafață, explică scăderea lentă. Pentru proba GaN500/SiC comportamentul lui S cu E_+ urmează același model ca pentru ambele probe GaN/Si și poate fi explicat în mod analog.

Saleh *et al.* a sugerat că valorile scăzute, $L_{\text{eff}} < 60$ nm, ale lungimii de difuzie a pozitronilor în GaN se datorează interacțiunii pozitronilor cu dizlocații [24]. Trebuie menționat faptul că semiconductorii cu rețea cristalină perfectă se așteaptă să aibă L_{eff} în intervalul 200–300 nm [30]. Cea mai lungă lungime efectivă de difuzie a pozitronilor $L_{\text{eff}} = 92 \pm 3$ nm pentru GaN a fost obținută pentru o proba de HVPE GaN [31]. În studiul prezentat cel mai bun L_{eff} a fost obținut pentru proba GaN500/SiC ca fiind 75 ± 20 nm.

3.4. Măsurători cu spectroscopie de anihilare a pozitronilor pentru materiale de moderare.
Rezultate experimentale.

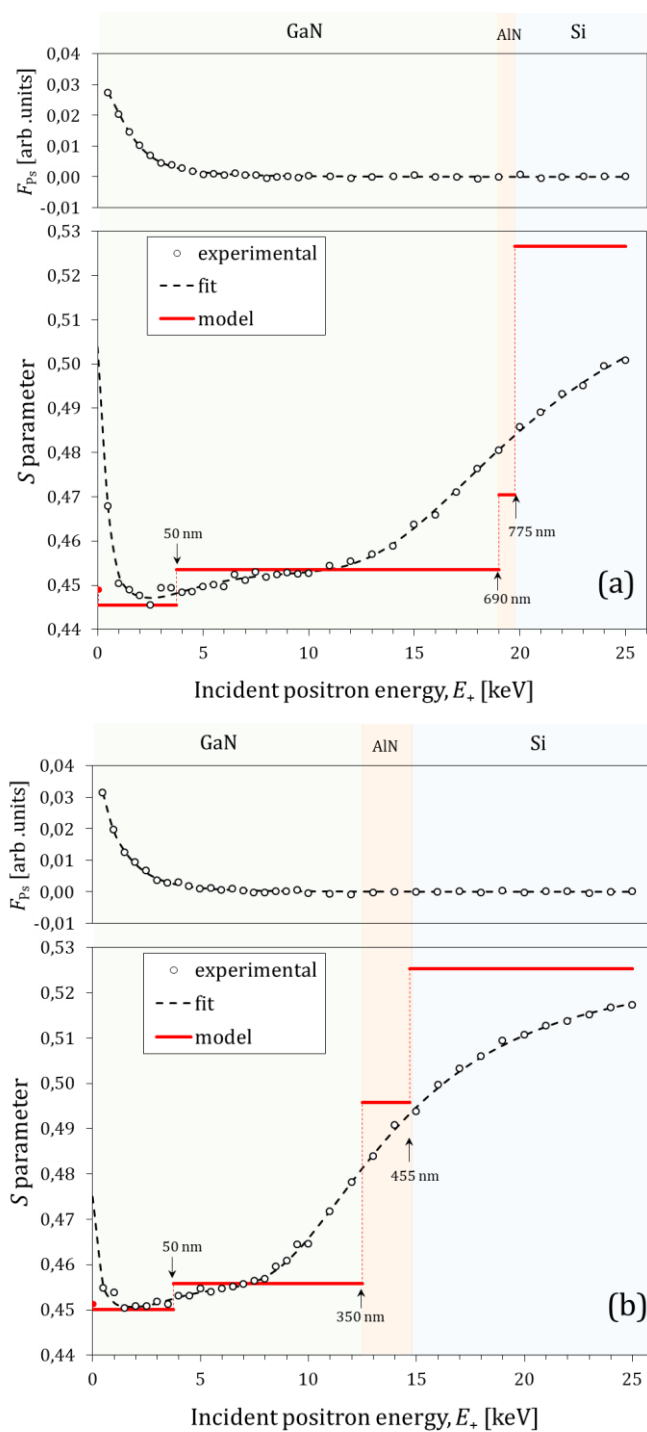


Figure 3.7. Plotted depth profiles $S(E_+)$ of (a) GaN700/Si and (b) GaN300/Si. The experimental errors are in the order of the experimental point size. The stairs represent the best parameters obtained by the fit of a 4-layer model to the experimental data by the VEPFIT software. The upper part of figure is the experimental data and the best fit of the relative Ps fraction, $F_{Ps}(E_+)$.

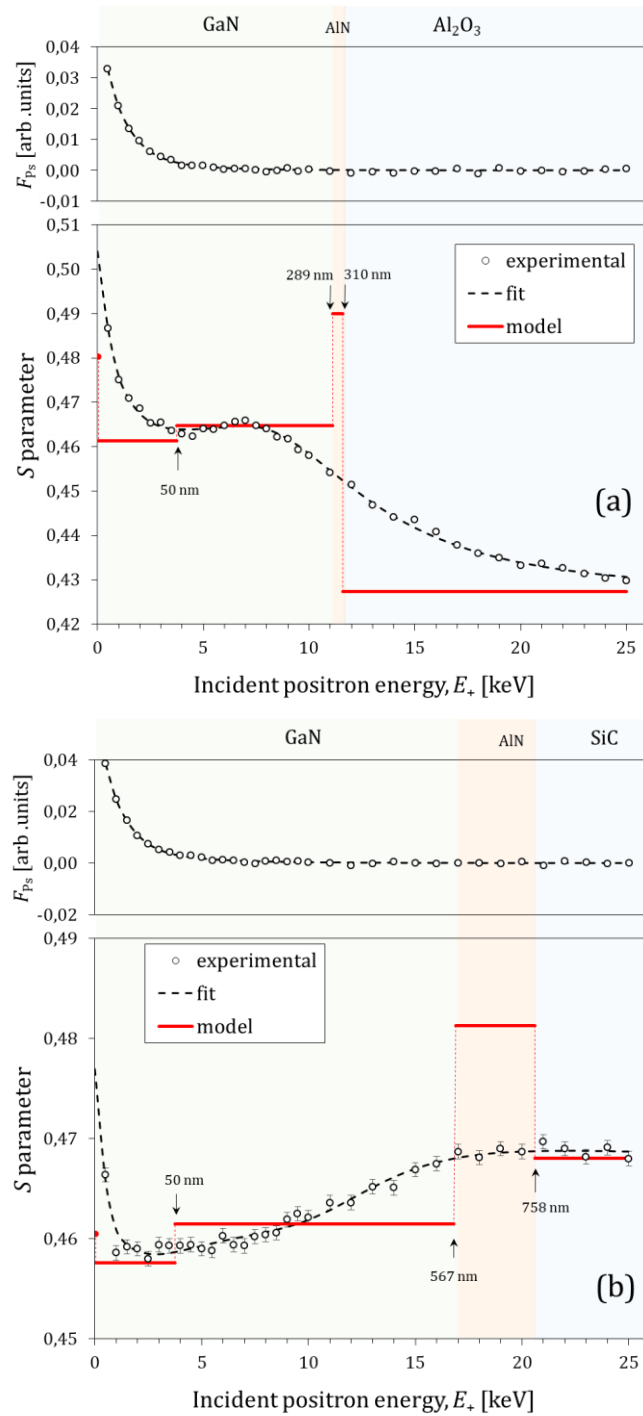


Figure 3.8. Plotted depth profiles $S(E_+)$ of (a) GaN300/Al₂O₃ and (b) GaN500/SiC. The experimental errors are in the order of the experimental point size. The stairs represent the best parameters obtained by the fit of a 4-layer model to the experimental data by the VEPFIT software. The upper part of figure is the experimental data and the best fit of the relative Ps fraction, $F_{Ps}(E_+)$.

3.4. Măsurători cu spectroscopie de anihilare a pozitronilor pentru materiale de moderare.
Rezultate experimentale.

Table 3.2. Best fit parameters obtained by VEPFIT from the $S(E_+)$ and $F_{Ps}(E_+)$ depth profiles for the GaN300/Si sample. The values without error margins are fixed parameters.

| Sample | | GaN300/Si $\chi^2 = 1.15$ | | |
|----------|------|---------------------------|------------|----------|
| Layer | | L_{eff} [nm] | S | d [nm] |
| Sublayer | | | | |
| GaN | GaN1 | 14.3 (5) | 0.4501 (6) | 50 |
| | GaN2 | 22 (6) | 0.4558 (4) | 300 |
| AlN | | 26 (10) | 0.4957 (2) | 105 |
| Si | | 245 | 0.5254 (5) | - |

Table 3.3. Best fit parameters obtained by VEPFIT from the $S(E_+)$ and $F_{Ps}(E_+)$ depth profiles for the GaN700/Si sample. The values without error margins are fixed parameters.

| Sample | | GaN700/Si $\chi^2 = 1.73$ | | |
|----------|------|---------------------------|------------|----------|
| Layer | | L_{eff} [nm] | S | d [nm] |
| Sublayer | | | | |
| GaN | GaN1 | 13.1 (4) | 0.4456 (4) | 50 |
| | GaN2 | 43 (6) | 0.4536 (3) | 640 |
| AlN | | 4 (33) | 0.4707 (3) | 85 |
| Si | | 245 | 0.5264 (1) | - |

Table 3.4. Best fit parameters obtained by VEPFIT from the $S(E_+)$ and $F_{Ps}(E_+)$ depth profiles for the GaN300/Al₂O₃ sample. The values without error margins are fixed parameters.

| Sample | | GaN300/Al ₂ O ₃ $\chi^2 = 1.39$ | | |
|--------------------------------|------|---|------------|----------|
| Layer | | L_{eff} [nm] | S | d [nm] |
| Sublayer | | | | |
| GaN | GaN1 | 12.5 (4) | 0.4613 (7) | 50 |
| | GaN2 | 41 (21) | 0.4647 (4) | 239 |
| AlN | | 21 (4) | 0.4901 (4) | 21 |
| Al ₂ O ₃ | | 80 | 0.4273 (3) | - |

Table 3.5. Best fit parameters obtained by VEPFIT from the $S(E_+)$ and $F_{Ps}(E_+)$ depth profiles for the GaN300/SiC sample. The values without error margins are fixed parameters.

| Sample | | GaN500/SiC $\chi^2 = 1.18$ | | |
|--------|----------|----------------------------|------------|----------|
| Layer | | L_{eff} [nm] | S | d [nm] |
| | Sublayer | | | |
| GaN | GaN1 | 13 (3) | 0.4576 (4) | 50 |
| | GaN2 | 75 (20) | 0.4615 (4) | 517 |
| AlN | | 25 (18) | 0.4813 (2) | 191 |
| SiC | | 150 | 0.4680 (7) | - |

Pe baza acestor rezultate, au fost publicate două articole în *Nanomaterials (Basel)* (see ref. [28]) și *Materials (Basel)* (see ref. [29]). Articolele s-au bazat pe munca de colaborare între două grupuri separate din ELI-NP și un grup de la Universitatea Politehnica din București. Din rezultatele publicate, numai datele obținute cu spectroscopia de anihilare a pozitronilor au fost utilizate în prezenta teză.

3.4.2. PAS pe folii de platină

Eficiența unui moderator poate fi îmbunătățită prin creșterea probabilității pozitronilor termalizați să fie reemisi de pe suprafața materialului. Această probabilitate este proporțională cu lungimea de difuzie a e^+ , L_+ , în interiorul materialului. Una dintre modalitățile de îmbunătățire a L_+ pentru metale precum W este de a efectua un tratament termic adecvat. Tungstenul are nevoie de recoacere la temperaturi de peste 2000 °C în vid, ceea ce este dificil, deoarece ar necesita un tip special de cuptor. Din acest motiv și pentru faptul că tungstenul este, de asemenea, dificil de prelucrat până la forma necesară, s-a decis că pentru sursa de e^+ ELI-NP materialul convertor-moderator este Pt. Hugenschmidt *et al.* au raportat deja în ref. [32] că Pt produce rezultate similare cu W, în ceea ce privește conversia γ la e^+ rapizi și moderarea e^+ .

Motivația din spatele măsurătorilor a fost de a determina parametrii optimi de recoacere a foliilor de Pt, prin metode PAS. Pentru a realiza acest lucru, fiecare set de 2 probe identice a fost tratat termic la temperaturi diferite și în condiții diferite (a se vedea Table 3.6).

3.4. Măsurători cu spectroscopie de anihilare a pozitronilor pentru materiale de moderare. Rezultate experimentale.

Table 3.6. Numele dat fiecărei probe împreună cu temperatura și durata de tratament termic și condițiile atmosferice

| Sample name | Sample characteristics | Annealing temperature (°C) | Annealing conditions | Annealing duration (hours) |
|-------------|--|----------------------------|-----------------------------------|----------------------------|
| Pt600V1h | | 600, | Vacuum (1×10^{-5} mbar) | 1 |
| Pt1100A1h | 2 Pt foils of $0.127 \times 10 \times 10$ mm | 1100 | Air (1×10^3 mbar) | 1 |
| Pt1100V1h | | 1100 | Vacuum (1×10^{-5} mbar) | 1 |
| Pt1100V4h | | 1100 | Vacuum (1×10^{-5} mbar) | 4 |

Măsurători PALS convenționale

Măsurătorile PALS convenționale au fost efectuate la Institute of High Energy Physics of the Chinese Academy of Sciences cu sistemul prezentat în Figure 3.9.

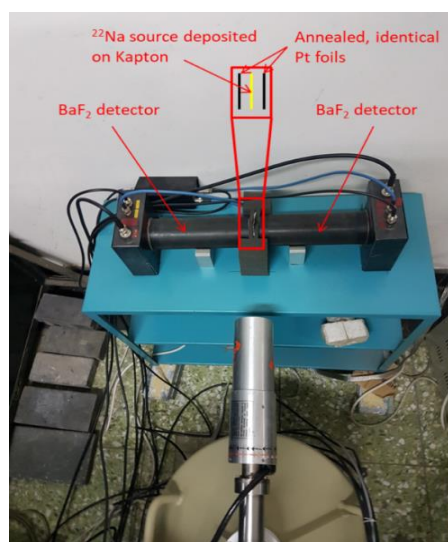


Figure 3.9. Configurația spectrometrului PALS convențional la Institute of High Energy Physics of the Chinese Academy of Sciences

Spectrele obținute au fost analizate cu software-ul LT9 [33] pentru a extrage durata de viață a pozitronilor în materialul studiat. Ca rezultat al analizei spectrelor, software-ul LT9 [33] calculează, de asemenea, durata medie de viață a pozitronilor alături de intensitățile corespunzătoare.

Rezultatele obținute din analiza LT9 a spectrelor măsurate sunt prezentate în Table 3.7, împreună cu datele teoretice și experimentale disponibile în literatură pentru probe similare. Se poate observa că pentru toate probele tratate termic la 1100 °C, $\tau_1 = [104 - 108]$ ns care este aproape de τ_b pentru folii de Pt cu rețea cristalină

perfectă, și este în acord cu rezultatele raportate în ref. [34] în care s-a constatat că τ_1 este de 104 ps pentru o folie de Pt similară recoaptă la 1600 K.

Table 3.7. Duratele medii de viață a pozitronilor, calculate pentru fiecare set de probe, obținut prin analiza LT9 împreună cu datele teoretice și experimentale disponibile în literatură.

| Numele probei | τ_1 (ps) | $d\tau_1$ (ps) |
|------------------------|---------------|----------------|
| Pt600V1h | 132 | 2 |
| Pt1100A1h | 104 | 1 |
| Pt1100V1h | 104 | 1 |
| Pt1100V4h | 108 | 1 |
| Pt (theoretical) [35] | 99 | - |
| Pt (experimental) [36] | 110 | 3 |

Măsurători cu fascicul de e^+ lenti

Măsurătorile au fost efectuate într-un mod analog cu măsurătorile DBS prezentate în Capitolul 3.4.1.

Un mod mai intuitiv de a prezenta $S(E_+)$ and $W(E_+)$ calculate este de a le aranja pe o hartă $S-W$. Figure 3.10 prezintă harta $S-W$ în care punctele obținute experimental sunt reprezentate de markerii goi. Cel mai bun fit obținut prin analiza VEPFIT a parametrilor S și W a fost reprezentat ca linie de tendință. În figură sunt, de asemenea, reprezentate punctele S and W caracteristice pentru fiecare set de probe. Se poate vedea că liniile „fitate” urmează punctele experimentale și că parametrii calculați, S și W , pentru fiecare probă sunt plasati pe aceste linii.

Table 3.8 prezintă durata de viață a pozitronilor în probele de Pt obținută prin analiza LT9 a datelor PALS, împreună cu L_+ calculat și cei mai buni parametri obținuți prin analiza VEPFIT a $S(E_+)$ și $W(E_+)$. Se poate observa că rezultatele obținute prin studiul DBS confirmă rezultatele obținute de PALS.

3.4. Măsurători cu spectroscopie de anihilare a pozitronilor pentru materiale de moderare.
Rezultate experimentale.

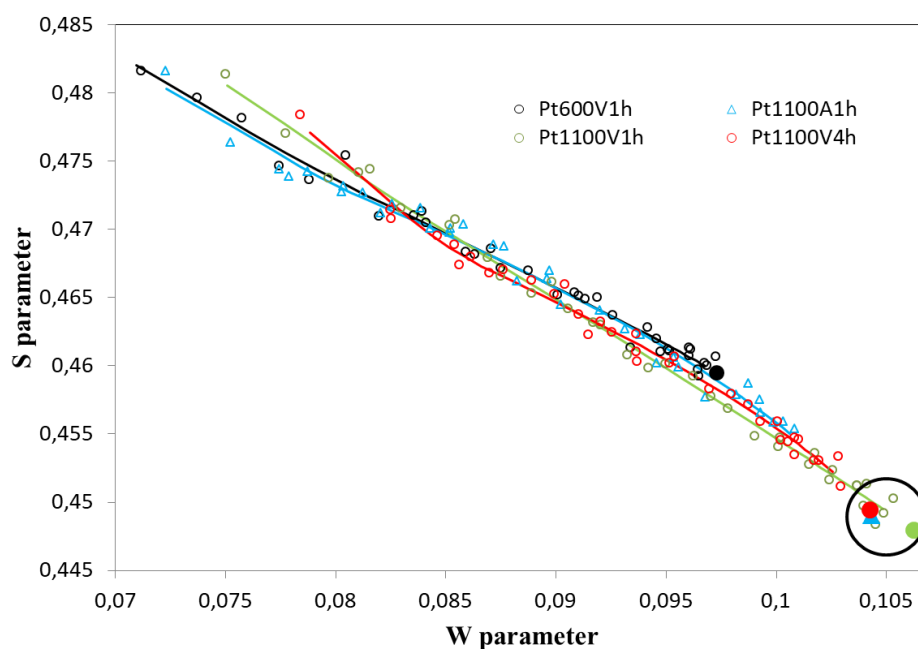


Figure 3.10. Harta S-W pentru toate foliile de Pt tratate termic Pt (reprezentate de markerii goi), împreună cu curbele obținute prin analiza VEPFIT (reprezentate de liniile de tendință) și parametrii caracteristici S vs. W calculați de VEPFIT (reprezentat de markerii umpluți mai mari)

Table 3.8. Durata de viață a pozitronilor în probele de Pt obținută prin analiza LT9 a datelor PALS, împreună cu L_+ calculat și cei mai buni parametri obținuți prin analiza VEPFIT a $S(E_+)$ și $W(E_+)$.

| Numele probei | τ_1 [ps] | L_+ [nm] | S | W |
|---------------|---------------|------------|-----------|-----------|
| Pt600V1h | 132 (2) | 45 (2) | 0.459 (2) | 0.098 (1) |
| Pt1100A1h | 104 (1) | 173 (4) | 0.449 (4) | 0.104 (2) |
| Pt1100V1h | 104 (1) | 64 (1) | 0.448 (2) | 0.107 (2) |
| Pt1100V4h | 108 (1) | 114 (3) | 0.449 (3) | 0.104 (1) |

Cel mai bun $L_+ = 173 \pm 4$ a fost obținut pentru proba Pt1100A1h.

Capitolul 4

4. Proiectarea și simularea sistemului de pulsare pentru fasciculul de pozitroni de la ELI-NP

PALS se bazează pe măsurarea duratei de viață a unui e^+ într-un solid. Pentru PALS, semnalul de oprire este întotdeauna preluat de la una dintre cele două cuante γ de 511 keV emise prin anihilarea pozitronului cu un electron din materialul studiat. Pentru a efectua PALS cu un fascicul de e^+ lenti este necesar un semnal de pornire. Dintre toate abordările pentru obținerea unui semnal de pornire pentru PALS cu fascicule de pozitroni lenti metoda cu cea mai bună rezoluție de timp posibilă constă în injectarea unor pulsuri ultra-scurte create prin tehnica „chopping and bunching” și preluarea semnalului de pornire din structura de sincronizare a dispozitivului pulsator.

4.1. Proiectarea sistemului de pulsare. Tehnica “bunching and chopping”

4.1.1. “ e^+ beam bunching”

Pentru fasciculele de e^+ principiul se bazează pe reglarea vitezei longitudinale a pozitronilor printr-un câmp electric dependent de timp. Procedând astfel, pozitronii sunt fie accelerați, fie decelerați, astfel încât timpul lor de sosire într-un anumit loc din spațiu este controlat.

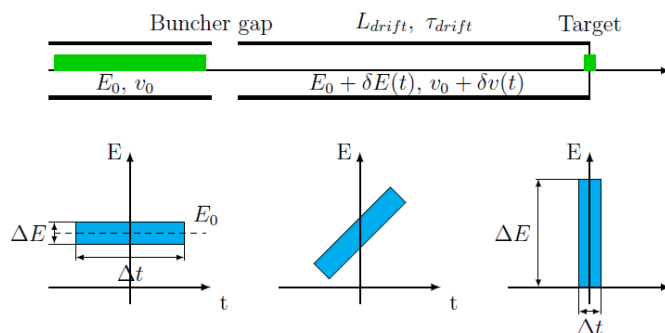


Figure 4.1. Principiul de funcționare al unui „ e^+ beam buncher” împreună cu transformarea fază-spățiu pe care acest sistem o realizează [37]. Această figura a fost adoptată din ref. [37].

Figure 4.1. prezintă principiul de funcționare al unui „ e^+ beam buncher” împreună cu transformarea fază-spățiu pe care acest sistem o realizează.

4.1. Proiectarea sistemului de pulsare. Tehnica “bunching and chopping”

4.1.2. “e⁺ beam chopping”

“Beam chopping” reprezintă o altă metodă de producere a unui fascicul pulsant de e⁺ dintr-o sursă continuă de e⁺. Pentru fascicule de e⁺ beams, construcția unui “chopper” este realizată de obicei printr-un deflector de fascicul sau prin așa-numitul “retarding potential chopper”.

Sistemul “retarding potential chopper” constă de obicei din trei plase de tungsten cu transmisie optică mare (> 95%) pe care se aplică diferite potențiale. Prima și ultima plasa sunt împământate, în timp ce pe plasa centrală se aplică un semnal de tăiere.

4.1.3. Proiectarea sistemului de pulsare a fasciculului de e⁺ de la ELI-NP

Sistemul de pulsare proiectat este prezentat în Figure 4.2.

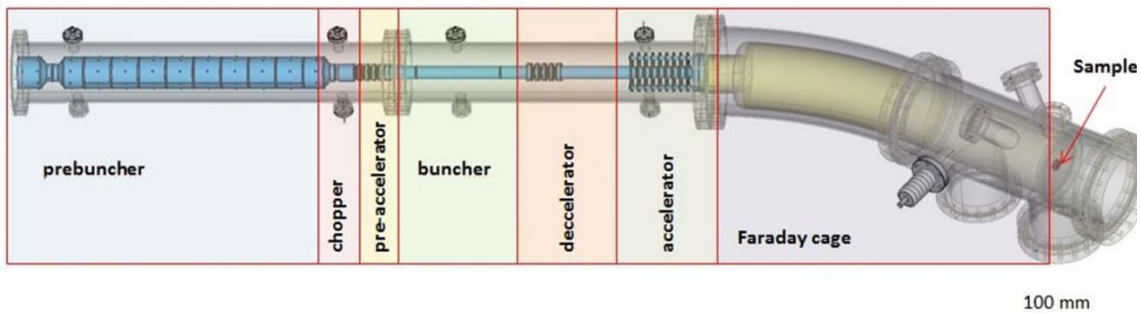


Figure 4.2. Proiectarea 3D a electrozilor din vid ai sistemului de pulsare. Se compune dintr-un „prebuncher, chopper, pre-accelerator, buncher, decelerator, accelerator, și un drift bent tube”.

Un program Matlab™ [38] a fost dezvoltat pentru a calcula mișcarea pozitronilor în câmpuri electrice care variază în timp. Sistemul a fost proiectat pentru un fascicul continuu de pozitroni cu energie de 29 eV și cu o distribuție realistă a energiei de 1 eV (FWHM).

4.2. Simulări privind performanța sistemului de pulsare.

4.2.1. “Pre-buncher”

Scopul unui „pre-buncher” este de a grupa pozitronii în așa fel încât atunci când intervalul de tăiere este aplicat fascicului, pierderile din intensitatea fascicului sunt minimizate.

Pentru simulare, a fost utilizat un semnal “sawtooth wave” de 40 MHz $\sim t^2$ cu o amplitudine de 8 V. Compresia în timp rezultată după ce fasciculul DC de e^+ a trecut de „pre-buncher” este prezentată în Figure 4.3.

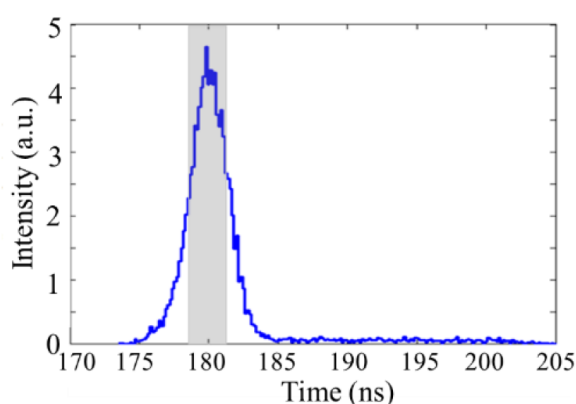


Figure 4.3. Compresia în timp rezultată după ce fasciculul DC de e^+ a trecut de „pre-buncher”.

4.2.2. “Chopper”

Scopul unui „chopper” este de a filtra acei pozitroni care nu vor ajunge la momentul potrivit la poziția “buncher-ului”. Ca rezultat, tăierea elimină posibilele peak-uri satelit și îmbunătățește raportul „peak to background”. Compresia în timp realizată de „pre-buncher” și lățimea ferestrei de transmisie a „chopper-ului” determină pierderile de intensitate ale fascicului datorate sistemului de pulsare. Pentru semnalele descrise mai sus, eficiența transmisiei sistemului de pulsare este de 65%.

4.2. Simulări privind performanța sistemului de pulsare.

4.2.3. “Main buncher”

„Buncherul” principal este a doua componentă de focalizare a sistemului de pulsare. Pentru a minimiza aberația cromatică din această componentă (datorită modulației energetice introduse de pre-buncher ca primă componentă de focalizare), după “chopper”, pozitronii sunt pre-acclerați la 1.5 keV [39].

Buncher-ul principal proiectat este un buncher de tip “single frequency (120 MHz) sine-wave double gap buncher” cu un electrod central de 96 mm . Efectul buncherului asupra fascicului de pozitroni este prezentat în Figure 4.4.

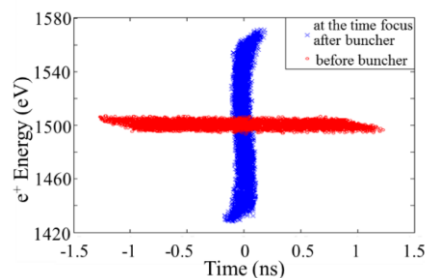


Figure 4.4. Transformarea fază-spațiu: înainte de buncher (în roșu) și după buncher (în albastru).

Distributia temporală a pulsurilor de e^+ obținute este foarte apropiată de un Gaussian cu FWHM = 109 ps (vezi Figure 4.5).

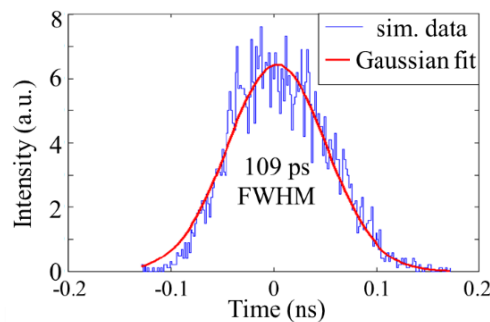


Figure 4.5. Distribuția temporală a pulsurilor de e^+ obținute.

Pe baza rezultatelor prezentate în Capitolul 4.2, un articol a fost publicat în *Journal of Physics: Conference Series*, in the Proceedings of the 14th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (vezi ref. [40]).

4.3. Proiectarea și simularea filtrului de energie pentru pozitronii retroimprastiați.

Atunci când pozitronii incidenți sunt implantați în ținta, o fracție este retroimprastiată. Dacă pozitronii retroimprastiați ajung înapoi la accelerator, aceștia pot fi reflectați de câmpul electric și implantați în probă cu o întârziere de la pulsul inițial de e^+ . Acest lucru provoacă distorsiuni semnificative în spectrul PALS ca peak-uri satelit [41–43]. Așa cum se poate vedea în Figure 4.2, la ELI-NP se prevede implementarea unui tub îndoit echipat cu bobine de ghidare pentru a minimiza distorsiunile în spectrele PALS.

4.3.1. Medii de simulare. Proiectarea sistemului.

Comsol Multiphysics® [44] a fost folosit pentru simularea câmpului magnetic care va ghida fasciculul de e^+ de la accelerator la centrul probei și pentru generarea câmpului electric al acceleratorului (vezi Figure 4.6).

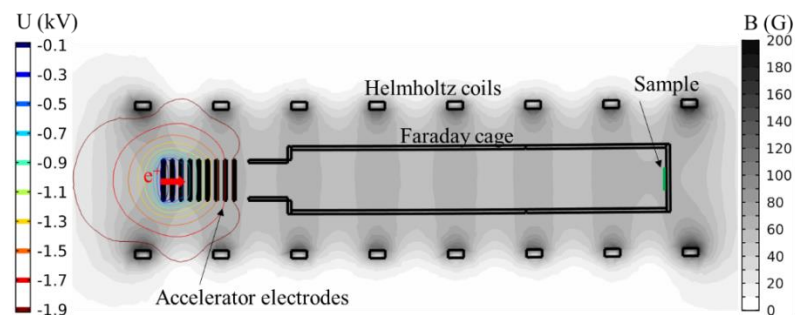


Figure 4.6. Câmpului magnetic care va ghida fasciculul de e^+ de la accelerator la centrul probei și câmpului electric al acceleratorului, simulate cu Comsol Multiphysics®.

Hărțile 3D ale simulărilor Comsol au fost exportate într-un format ASCII în care valorile câmpurilor magnetice și electrice au fost luate punct cu punct într-un model de rețea și importate în software-ul Geant4 unde au fost efectuate simulările privind retroimprastierea pozitronilor.

Modelele de fizică din Geant4 nu țin cont de durata de viață a e^+ într-un material, prin urmare histograma de timp nu reprezintă de fapt un spectru PALS ci doar funcția de rezoluție, $R(t)$. Dacă pozitronii anihilează dintr-un număr discret de stări, spectrul PALS poate fi descris ca o convoluție a funcției de rezoluție și probabilitățile de anihilare din aceste stări::

4.3. Proiectarea și simularea filtrului de energie pentru pozitronii retroimprastiați.

$$y(t) = R(t) \otimes \left(N_t \sum_{i=1}^n \left(\frac{I_i}{\tau_i} \right) \exp \left(-\frac{t}{\tau_i} \right) + B, \right. \quad 4.1$$

Pentru a studia efectul pozitronilor retroimprastiați, am simulat spectrele PALS care convolvează funcția de rezoluție $R(t)$ cu patru componente cu durate de viață $[\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4] = [0.1, 0.5, 3, 20]$ ns și intensități corespunzătoare $[I_1, I_2, I_3, I_4] = [10, 60, 10, 20]\%$.

Exemplul unui spectru simulat este prezentat în Figure 4.7a. Figure 4.7b prezintă un spectru simulat cu retroimprastiere suprimată pentru comparație.

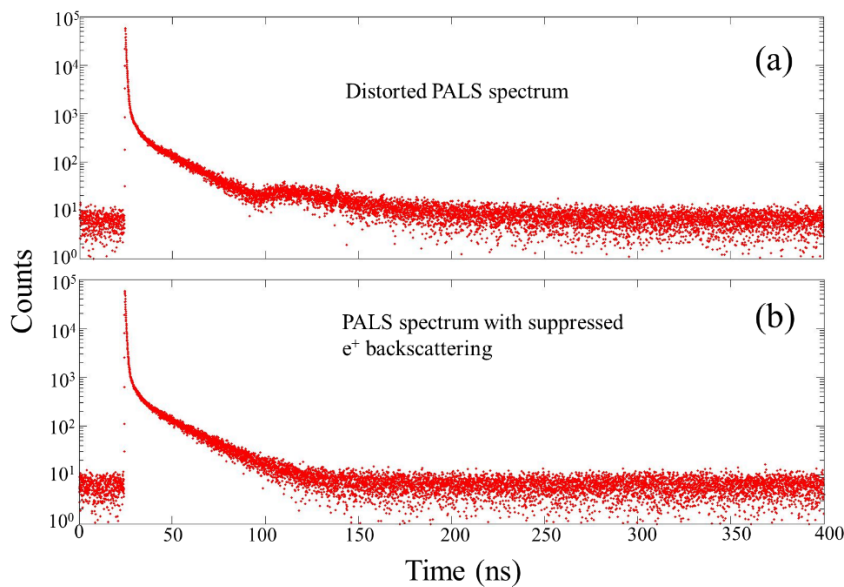


Figure 4.7. Spectre PALS simulate pentru un fascicul de $E_+ = 2$ keV. b) Spectre PALS simulate pentru un fascicul de $E_+ = 2$ keV cu retroimprastiere suprimată.

4.3.2. Analiza și rezultatele datelor de simulare.

Pentru a minimiza efectul retroimprastierii e^+ au fost simulate două soluții posibile. Ambele soluții pot fi văzute în Figure 4.8. Prima soluție este de a adauga o apertura la ieșirea acceleratorului cu un diametru, D , comparabil cu dimensiunea spotului fasciculului. A doua soluție este de a trece fasciculul de e^+ accelerați printr-un tub îndoit echipat cu bobine de direcție pentru a acționa ca un filtru de energie.

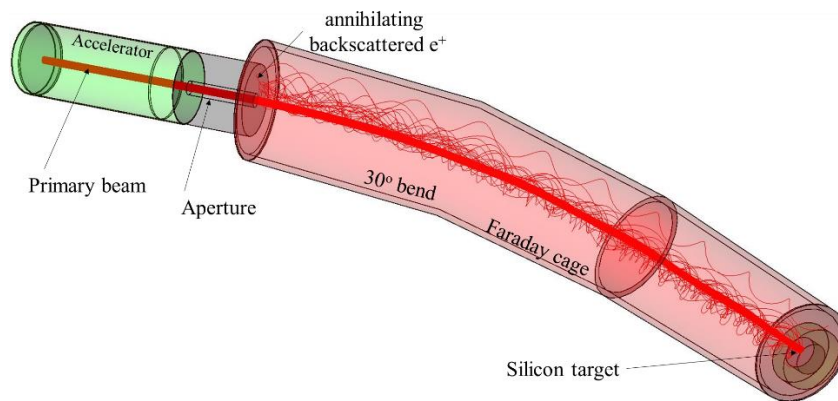


Figure 4.8. Traectoriile unui fascicul de e^+ de 2 keV beam a și evenimentul de retroimprastiere 1000 de particule incidente particles. Exemplul unui tub indoitla 30° bend cu o apertur de $D = 15$ mm.

Figure 4.9. prezintă spectre PALS simulate pentru un fascicul de $E_+ = 5$ keV într-o geometrie cu un tub drept cu două dimensiuni ale aperturii (60 și 15 mm).

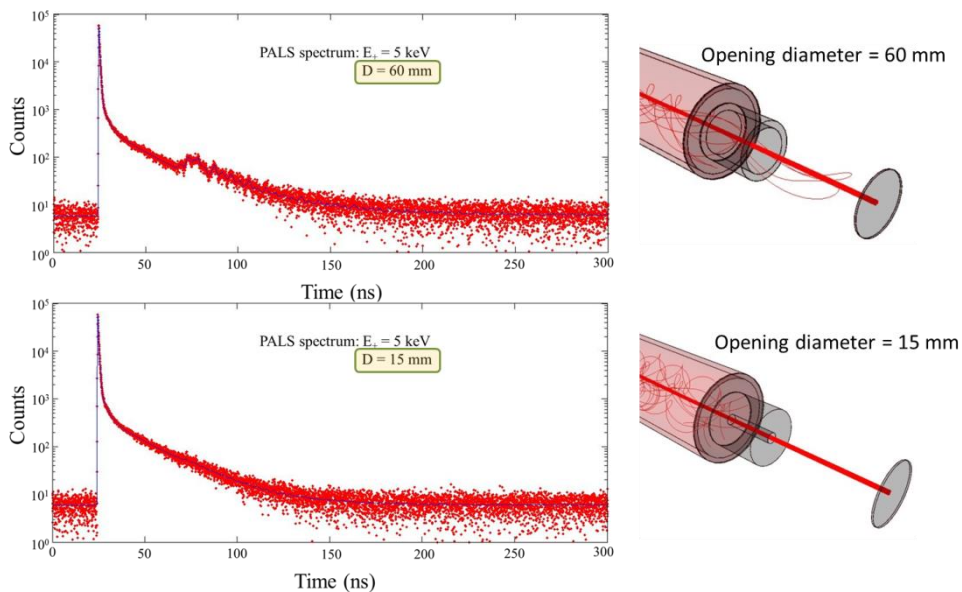


Figure 4.9. Spectre PALS simulate pentru un fascicul de $E_+ = 5$ keV într-o geometrie cu un tub drept cu două dimensiuni ale aperturii.

Prin aplicarea celei de-a doua soluții, adică implementarea unui tub curbat echipat cu bobine de direcție pentru a acționa ca un filtru de energie, fasciculul de e^+ retroimprastiat va fi forțat să se îndepărteze de deschiderea aperturii. Acest efect poate fi vizualizat în Figure 4.10.

4.3. Proiectarea și simularea filtrului de energie pentru pozitronii retroimprastiați.

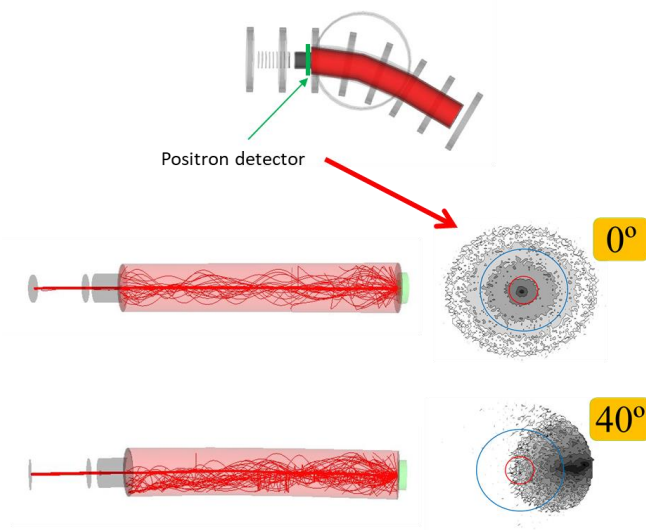


Figure 4.10. Deviația fascicului de e^+ retroimprastiați fata de deschiderea aperturii. Cercul roșu reprezintă o deschidere de 15 mm, în timp ce cel albastru reprezintă o deschidere de 60 mm.

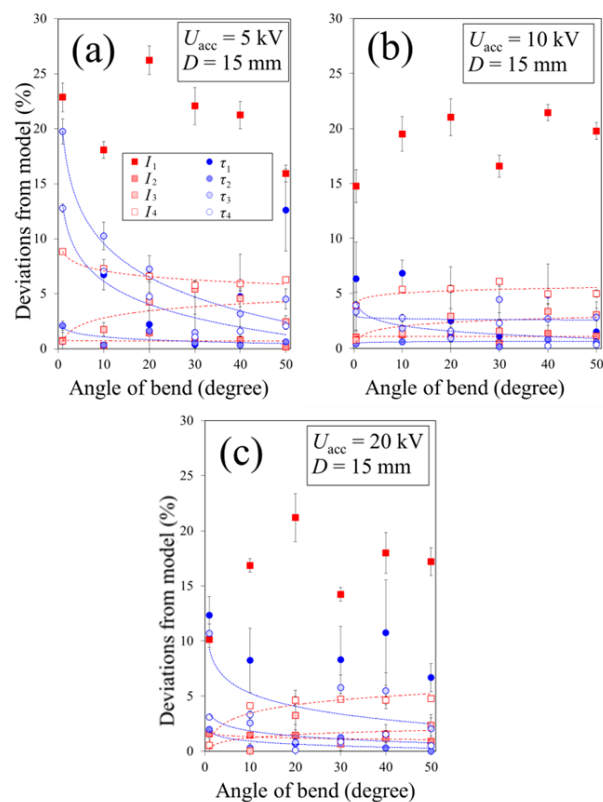


Figure 4.11. Abaterile parametrilor de la spectrul model PALS pentru un fascicul de e^+ de diferite energii: a) $E_+ = 5$ keV, b) $E_+ = 10$ keV și c) $E_+ = 20$ keV în funcție de unghiul de îndoire.

Simulările Geant4 efectuate au ajutat la identificarea originii distorsiunilor din spectrele PALS cauzate de retroimprastierea e^+ . Simulările au arătat că adăugarea unei

aperturi la ieșirea acceleratorului în combinație cu implementarea unui tub curbat, care acționează ca un filtru de energie, este o soluție satisfăcătoare pentru a reduce distorsiunile. Rezultatele obținute arată că pentru unghiurile de încovoiere $\geq 30^\circ$ abaterea de la parametrii modelului indusă de retroimprastierea e^+ începe să se satureze, ajungând la $\Delta_1 < 5\%$ pentru E_+ în intervalul 2 - 20 keV.

Pe baza rezultatelor prezentate în Capitolul 4.3, două articole au fost publicate în Acta Physica Polonica Series A (see ref. [45]) și în U.P.B. Scientific Bulletin, Series A (see ref. [46]).

Concluzii

Această teză a prezentat planurile generale pentru laboratorul de spectroscopie cu pozitroni ELI-NP, împreună cu o prezentare detaliată a două particularități. Un experiment PAS a fost efectuat la Institute of High Energy Physics of the Chinese Academy of Sciences, Beijing, pentru caracterizarea unui tip de material moderator asistat de câmp electric, filme subțiri GaN, cu ajutorul DBS, în timp ce ultima metodă, împreună cu PALS au fost utilizate pentru a determina parametrii optimi de recoacere pentru materialul ELI-NP ales pentru conversia “ γ to e^+ ” și moderarea e^+ rapizi. A doua particularitate a laboratorului ELI-NP, care este descrisă în detaliu în această teză, este proiectarea conceptuală a sistemului de pulsare pentru experimentul PALS. Detalii despre proiectarea și simularea performanței sistemului de pulsare sunt prezentate în detaliu în capitolul 4.

În prezentul studiu din toate cele patru probe de GaN cea mai bună lungime eficientă de difuzie a pozitronilor a fost obținută pentru filmul GaN de 500 nm grosime crescut pe un substrat de SiC, ca fiind 75 ± 20 nm. Materialele studiate, datorită cantităților mari de defecte, difuziei și non-stoichiometriei parțiale, implică încă multe limitări în utilizarea lor ca și moderatori de pozitroni.

Al doilea studiu PAS a fost realizat cu scopul de a determina cei mai buni parametri de recoacere pentru materialul convertor-moderator ELI-NP. Studiul a fost necesar deoarece pentru aplicarea fasciculelor e^+ lenti este foarte importanta maximizarea eficienței moderatorului. Cea mai bună lungime de difuzie a

4.3. Proiectarea și simularea filtrului de energie pentru pozitronii retroimprastiați.

pozitronilor, $L_+ = 173 \pm 4$ nm, a fost obținută pentru proba tratată termic în aer timp de 1 oră.

A doua parte a tezei a prezentat în detaliu sistemul de pulsare a fasciculului de pozitroni dezvoltat pentru implementarea experimentului PALS. Sistemul de pulsare ELI-NP va fi compus din: “prebuncher, chopper, pre-accelerator, buncher, decelerator, accelerator, și un bent drift tube”. Sistemul proiectat combină cele mai recente dezvoltări realizate în domeniul pulsării fasciculelor de particule cu sarcină pentru a obține cea mai bună compresie temporală a pulsurilor de pozitroni. În primul rând, sunt prezentate simulări privind performanța sistemului de pulsare. Simularile MATLAB optimizate au dovedit că distribuția temporală a pulsurilor de pozitroni la poziția țintei este foarte apropiată de un Gaussian cu FWHM = 109 ps. În a doua parte a Capitolului 4 este prezentat un raport detaliat cu privire la proiectarea și simularea filtrului de energie pentru pozitronii retroimprastiați. Un astfel de filtru de energie este necesar pentru a minimiza distorsiunile din spectrele PALS cauzate de pozitronii retroimprastiați. Soluția care va fi implementată la ELI-NP constă într-un tub îndoit, echipat cu bobine de direcție care acționează ca un filtru de energie. Rezultatele obținute arată că pentru unghiurile de încovoiere $\geq 30^\circ$ abaterea de la parametrii modelului indusă de retroimprastierea e^+ începe să se sature, ajungând la $\Delta_1 < 5\%$ pentru E_+ în intervalul 2–20 keV. Curbura de 30° poate fi considerată o soluție optimă care ar trebui să fie suficientă pentru a minimiza efectul pozitronilor retroimprastiați.

În prezent, în Europa există doar două facilități de spectroscopie cu pozitroni dedicate utilizatorilor externi, ambele situate în Germania. O implementare cu succes a laboratorului de spectroscopie cu pozitroni prezentat se va dovedi benefică pentru comunitatea științifică, deoarece există un interes tot mai mare pentru studiul materialelor avansate. Mai mult, odată cu implementarea noului sistem Variable Energy Gamma-ray (VEGA) la ELI-NP, fasciculul γ va fi livrat cu densitate spectrală ridicată (≥ 500 photons/s/eV) în “macro bunches” cu o rată de repetiție de 40 MHz [47]. Singura parte a laboratorului de spectroscopie de pozitroni modificată de noul sistem VEGA este aceea că nu este nevoie un “ e^+ pulse stretcher”, deoarece fasciculul de pozitroni va fi creat ca cvasi continuu datorită ratei mari de repetiție a fasciculului γ . Restul parametrilor fasciculului de pozitroni ELI-NP prezentat în această teză vor rămâne neschimbați.

Mulțumiri

În primul rând aș dori să mulțumesc coordonatorului meu, Dr. Nikolay Djourellov, fără de care această teză nu ar fi existat. El m-a introdus în domeniul spectroscopiei de anihilare a pozitronilor și, de-a lungul anilor, mi-a dezvoltat interesul pentru subiect. Aș dori să-i mulțumesc pentru înțelegere și calm, chiar și în cazurile în care acestea nu erau justificate și pentru că mi-a transferat cu răbdare cunoștințele în domeniu.

Aș dori să mulțumesc conducătorului meu, Prof. Dimiter Balabanski, pentru că mi-a oferit ocazia de a face parte din laboratorul de spectroscopie cu pozitroni ELI-NP, ceea ce mi-a permis să-mi desfășor studiile doctorale. Aș dori să-i mulțumesc pentru numeroasele sfaturi și pentru încurajarea constantă, care mi-au permis să mă dezvolt ca cercetător. De asemenea, trebuie să-i mulțumesc lui Dr. Victor Leca, deoarece el este cel care mi-a sugerat să mă alătur echipei ELI-NP și dl-ui Prof. Călin Ur pentru că mi-a oferit ocazia de a face parte din programul de doctorat S.D.I.A.L.A.

Vreau să-mi exprim recunoștința față de grupul de spectroscopie de pozitroni de la Institute of High Energy Physics of the Chinese Academy of Sciences, în special dl-ui Dr. Wang Bao-Yi și Dr. Cao Xing-Zhong pentru că mi-au permis să efectuez studiile de spectroscopie cu pozitroni necesare pentru această teză în laboratorul lor.

Nu în ultimul rând, aș dori să mulțumesc tuturor membrilor Departamentului Gamma Driven Experiments și ai Diviziei Tehnice a ELI-NP, deoarece finalizarea acestei teze nu ar fi posibilă dacă nu pentru colegii potriviți și un mediu de lucru excelent.

Lucrările raportate în această teză au fost susținute de proiectul Extreme Light Infrastructure Nuclear Physics (ELI-NP) Fazele I și II, un proiect cofinanțat de Guvernul României și Uniunea Europeană prin Fondul European de Dezvoltare Regională.

Bibliografie

- [1] P. G. Coleman, *Positron Beams and Their Applications* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 2000).
- [2] R. Krause-Rehberg and H. S. Leipner, *Positron Annihilation in Semiconductors: Defect Studies* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1999).
- [3] Y. C. Jean, P. E. Mallon, and D. M. Schrader, *PRINCIPLES AND APPLICATIONS OF POSITRON AND POSITRONIUM CHEMISTRY* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 2003).
- [4] S.-H. Chang, I. A. Parinov, and V. Yu. Topolov, *Advanced Materials: Physics, Mechanics and Applications* (Springer International Publishing Switzerland, 2014).
- [5] <https://Eli-Laser.Eu/the-Eli-Project/> (n.d.).
- [6] S. Gales, K. A. Tanaka, D. L. Balabanski, et al., *Reports on Progress in Physics* **81**, 094301 (2018).
- [7] O. Adriani and et al., *ArXiv.Org Accelerator Physics (physics.acc-ph)*, **arXiv:1407.3669**, (2014).
- [8] P. J. Mohr, D. B. Newell, and B. N. Taylor, *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **45**, 043102 (2016).
- [9] [http://NuclearData.Nuclear.Lu.Se/ Database/NuDat/](http://NuclearData.Nuclear.Lu.Se/Database/NuDat/). (n.d.).
- [10] <https://Nds.Iaea.Org/ReInsd/Vcharhtml/VChartHTML.html> (n.d.).
- [11] I. Procházka, *Materials Structure* **8**, (2001).
- [12] <https://Www.Fe.Infn.It/Radioactivity/Educational/Detection.html> (n.d.).
- [13] R. Krause-Rehberg, http://Positron.Physik.Uni-Halle.de/Talks/ICPA-15_ISPS_lecture_RKR.Pdf (n.d.).
- [14] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics, 3rd Edition* (John Wiley & Sons, Inc, New York, 1999).
- [15] In *Electromagnetism* (John Wiley & Sons, Ltd, 2013), pp. 443–465.
- [16] N. Anderson, *The Electromagnetic Field* (Springer, Boston, MA, 1968).
- [17] C. Piochacz, PhD Thesis (2009).
- [18] N. Djourellov, C. Hugenschmidt, S. Balascuta, et al., *Romanian Reports in Physics* **68**, 735 (2016).
- [19] I. Dobrin, N. Djourellov, D. Enache, et al., *UPB Scientific Bulletin, Series A: Applied Mathematics and Physics* **81**, 241 (2019).

- [20] N. Djourellov, A. Oprisa, D. Dinescu, et al., *Journal of Physics: Conference Series* **791**, 012011 (2017).
- [21] N. Djourellov, D. Dinescu, and V. Leca, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **934**, 19 (2019).
- [22] L. V. Jørgensen and H. Schut, *Applied Surface Science* **255**, 231 (2008).
- [23] J. P. Merrison, M. Charlton, B. I. Deutch, et al., *Journal of Physics Condensed Matter* **4**, L207 (1992).
- [24] Sagr Saleh, and Awla Moftah Elhasi, *American Journal of Modern Physics* **3**, 24 (2014).
- [25] <https://www.Ntt-at.Com/> (n.d.).
- [26] A. van Veen, H. Schut, J. de Vries, et al., in *American Institute of Physics Conference Series* (1991), pp. 171–198.
- [27] A. van Veen, H. Schut, M. Clement, J. de Nies, A. Kruseman, M. Ijpma, *Appl. Surf. Sci.* **85**, 216 (1995).
- [28] V. L. Ene, D. Dinescu, N. Djourellov, et al., *Nanomaterials (Basel)* **10**, (2020).
- [29] V. L. Ene, D. Dinescu, I. Zai, et al., *Materials (Basel)* **12**, (2019).
- [30] P. J. Schultz, E. Tandberg, K. G. Lynn, et al., *Phys. Rev. Lett.* **61**, 187 (1988).
- [31] A. Uedono, M. Malinverni, D. Martin, et al., *Journal of Applied Physics* **119**, 245702 (2016).
- [32] C. Hugenschmidt, G. Kögel, R. Repper, et al., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **198**, 220 (2002).
- [33] J. Kansy, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **374**, 235 (1996).
- [34] G. Brauer, W. Anwand, E.-M. Nicht, et al., *Phys. Rev. B* **62**, (2000).
- [35] J M Campillo Robles, E Ogando and F Plazaola, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, (2007).
- [36] J. M. C. Robles, F Plazaola, *Trans Tech Publications Defect and Diffusion Forum Vols*, 213 (2003).
- [37] L. Ravelli, PhD Thesis (2014).
- [38] MATLAB, *Version R2010a* (The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 2010).
- [39] A. Laakso, PhD Thesis (2005).
- [40] N. Djourellov and D. Dinescu, *Journal of Physics: Conference Series* **791**, 012010 (2017).

- [41] M. Jungmann, J. Haerberle, R. Krause-Rehberg, et al., *Journal of Physics: Conference Series* **443**, 012088 (2013).
- [42] H. Marinov, N. Djourelov, P. Nedelec, et al., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* **729**, 569 (2013).
- [43] P. Willutzki, J. Stormer, G. Kogel, et al., *Measurement Science and Technology* **5**, 548 (1994).
- [44] COMSOL Multiphysics®, [Www.Comsol.Com](http://www.comsol.com), Stockholm, Sweden (n.d.).
- [45] D. Dinescu and N. Djourelov, *Acta Physica Polonica A* **132**, 1624 (2017).
- [46] D. Dinescu and N. Djourelov, *U.P.B. Sci. Bull., Series A* **79**, 317 (2017).
- [47] [Www.Eli-Np.Ro](http://www.eli-np.ro) (n.d.).