



UNIVERSITATEA POLITEHNICA  
DIN  
BUCUREȘTI



Școala Doctorală de Ingineria și Aplicațiile Laserilor și  
Acceleratorilor

Decizia nr. \_\_\_\_\_ din \_\_\_\_\_

# TEZĂ DOCTORAT REZUMAT

**Andreea Bianca ȘERBAN (GHERGHE)**

---

NOI MATERIALE PENTRU MODERAREA DE  
POZITRONI

---

## COMISIE DOCTORAT

<b>CS I Dr. Ing. Alexandru Călin Ur</b> Univ. Politehnica București & ELI-NP	Președinte
<b>Prof. Dr. Dimiter Lukanov Balabanski</b> Univ. Politehnica București & ELI-NP	Conducător doctorat
<b>CS II Dr. habil. Nikolay Ivanov Djourellov</b> Univ. Politehnica București & ELI-NP	Referent
<b>CS I Dr. habil. Cristian Mihail Teodorescu</b> Universitatea din București & NIMP	Referent
<b>Prof. Dr. Patrick Nédélec</b> Universitatea Lyon 1 (UCBL) & Institutul de Fizică a celor 2 Infinite (IP2I)	Referent

**BUCUREȘTI 2023**

---



# Mulțumiri

Aș dori să profit de această ocazie pentru a-mi exprima cele mai profunde mulțumiri față de conducătorul meu de doctorat, Dr. Dimiter Balabanski, pentru sprijinul și încurajările sale neobosite pe parcursul lucrului la teză. Îi sunt recunoscător dincolo de cuvinte pentru că am avut posibilitatea de a învăța de la el. În plus, nu aș fi reușit să avansez pe această cale dacă comitetul de îndrumare, format din Dr. Nikolay Djourellov, Dr. Victor Leca și Dr. Cristian Teodorescu, nu mi-ar fi oferit un ajutor fără rezerve și constant sub formă de sfaturi și sprijin. Fără acesta, nu aș fi putut face niciun progres și această aventură nu ar fi fost posibilă dacă nu ar fi fost ajutorul lor.

Aș dori să îmi exprim marea mea apreciere față de Laboratorul de Ținte și de Laboratorul de Pozitroni, în special față de șefii laboratoarelor, precum și față de Doru Dinescu, Cristina Gheorghiu, Iulia Zai, Daniel Popa, Ionela Iliescu, Marcel Conde și Aurelia Ionescu pentru sprijinul intelectual legat de părțile experimentale ale tezei și pentru răbdarea și feedback-ul neprețuit. De asemenea, un mare sprijin mi-a fost oferit de către cei de la Universitatea Politehnica din București din cadrul Departamentului de Știința și Ingineria Materialelor Oxidice și Nanomateriale, în special Vladimir Lucian Ene, Ionela Neașu, Bogdan Vasile și alții, care m-au ajutat să depășesc dificultățile și mi-au dat sfaturi pentru întocmirea competentă a lucrării. Aș dori să adresez sincere mulțumiri colegilor mei din Departamentul de Expertize Gamma Driven, în special colegilor de birou care m-au învățat lecții valoroase de știință și de viață. Nu în ultimul rând, aș dori să recunosc ajutorul personalului ELI-NP, ICPE-CA și IFIN-HH care a depus eforturi mari pentru a mă ajuta să realizez rezultatele incluse în această teză.

Aș fi neglijentă dacă nu i-aș menționa pe prietenii și familia mea prețioasă, în special pe fratele meu Nicolae, părinții mei, Anișoara și Ion, soțul meu Marian și fiul meu drag Theo. Încrederea lor în mine a servit drept forță motrice pentru mine pe tot parcursul acestui proces.



# Cuprins

<b>Lista de figuri .....</b>	<b>v</b>
<b>Lista de tabele.....</b>	<b>vii</b>
<b>Capitolul 1 Introducere .....</b>	<b>1</b>
A. Motivația științifică .....	2
B. Structura tezei.....	4
<b>Capitolul 2 Aspecte teoretice.....</b>	<b>5</b>
2.1 Surse de pozitroni. Moderatori de pozitroni.....	5
2.2 Materiale pe bază de nitruri și oxizi. Defecte cristaline.....	8
2.3 Depunerea de filme subțiri. Pulverizare magnetronică .....	11
<b>Capitolul 3 Moderator. Fabricare și caracterizare.....</b>	<b>13</b>
3.1 Experimental setup.....	14
3.2 O scurtă introducere în metodele de caracterizare. ....	15
3.3 Depuneri de nitrură de galiu.....	18
3.4 Strat tampon .....	20
3.4.1 Nitrură de aluminiu (AlN).....	20
3.4.2 Oxid de zinc (ZnO).....	21
3.4.3 Nitrură de titan (TiN).....	21
3.5 Rezumat.....	22
<b>Capitolul 4 Studii asupra probelor de GaN disponibile în comerț.....</b>	<b>23</b>
4.1 Materiale si metode .....	23
4.2 Rezultate si discuții .....	24
4.3 Rezumat.....	26
<b>Capitolul 5 Optimizarea și fabricarea dispozitivului de moderare a pozitronilor bazat pe o capcană magnetică.....</b>	<b>29</b>

5.1 Conceptul de dispozitiv bazat pe capcana magnetică. ....	30
5.1.1 Capcană magnetică ideală .....	30
5.1.2 Limitări de proiectare. Sursă de pozitroni rapizi și moderator .....	32
5.2 Procedura de simulare numerică .....	32
5.3 Rezultatele simulărilor numerice .....	33
5.4 Fabricarea dispozitivului de moderare a pozitronilor .....	36
5.4.1 Construcția bobinelor .....	36
5.5 Proiectarea și asamblarea instalației experimentale .....	36
5.5.1 Iradierea foliilor de Ti.....	38
5.5.2 Recoacerea W .....	38
5.6 Rezultate.....	38
5.7 Rezumat.....	40
<b>Capitolul 6 Concluzii și perspective .....</b>	<b>41</b>
<b>Bibliografie .....</b>	<b>43</b>

# Lista de figuri

<b>Figura 1</b> Dispunerea echipamentelor din laboratorul de spectroscopie cu pozitroni ELI-NP ..	2
<b>Figura 2.1</b> Diagrama schematică de moderare FA a unui moderator de siliciu din ref. [33]. Pozitronul se termalizează până la o poziție $(r, \theta)$ în 10 ps la o adâncime de implantare de $x = r\cos\theta$ . Acesta urmează apoi direcția câmpului $E$ aplicat, ajungând în cele din urmă la un contact subțire de siliciu (20 Å) și fiind emis în vid .....	7
<b>Figura 2.2</b> Dezvoltarea unui dispozitiv capcană magnetică de Gerchow și colab. [18], conceput cu două folii de Ti iradiat ( <i>sursă</i> ), o folie de W (110) ilustrată ca <i>moderator</i> și o grilă de extracție plasată în interiorul unei capcane magnetice. Pozitronii sunt confinați și își pierd energia prin treceri multiple prin foliile moderatoare. Grila de extracție este menținută la potențialul de masă pentru a maximiza eficiența pozitronilor moderați. ....	8
<b>Figura 2.3</b> Moduri de creștere. (a) Creșterea Volmer-Weber; (b) Creșterea Stranski-Krastanov; (c) Creșterea Frank-van der Merwe [43].....	9
<b>Figura 2.4</b> Mai multe tipuri de defecte de rețea [46] .....	10
<b>Figura 2.5</b> Schema procesului de pulverizare magnetronică .....	12
<b>Figura 3.1</b> Diagramă pas cu pas care arată fabricarea moderatorului de pozitroni .....	14
<b>Figura 3.2</b> Rezumat al diferitelor semnale obținute prin interacțiunea electronilor cu materia .....	16
<b>Figura 3.3</b> Diagrama efectului fotoelectric în XPS.....	17
<b>Figura 3.4</b> Imagini AFM ale filmelor de GaN cu grosimi diferite crescute pe substrat de $Al_2O_3$ (a) film subțire, (b) film gros .....	19
<b>Figura 3.5.</b> Scanări XRD 2theta pentru straturile de AlN crescute pe substraturi de Si .....	20
<b>Figura 3.6</b> Scanări XRD 2theta pentru straturile de ZnO crescute pe Si .....	21

<b>Figura 3.7</b> Scanare XRD 2theta a ST4 care arată TiN (200) .....	22
<b>Figura 4.1</b> Profiluri de adâncime $S(E^+)$ ale GaN/SiC. Erorile experimentale sunt de ordinul mărimii punctului experimental. Scările reprezintă cei mai buni parametri obținuți prin ajustarea unui model cu 4 straturi la datele experimentale cu ajutorul software-ului VEPFIT. Valorile reprezintă grosimea cumulată a straturilor. Partea superioară a figurii reprezintă datele experimentale și cea mai bună potrivire a fracției relative $P_s, F_{Ps}(E^+)$ .....	25
<b>Figura 5.1</b> Schema secțională a dispozitivului bazat pe o capcană magnetică, care prezintă o cameră cu două bobine ce funcționează ca oglinzi magnetice și un tub de transport [87] .....	31
<b>Figura 5.2</b> Spotul de pozitroni moderați pentru configurația bobinelor L10w7 sub ghidaj magnetic $B_{zt} = 100$ G în interiorul solenoidului de transport. Cercul alb marchează zona centrală de $\varnothing 10$ mm [87] .....	34
<b>Figura 5.3</b> Frația de pozitroni moderați totali și "utili" detectați împreună cu $B_{max}$ în cazul configurației bobinelor prezentate în Tablul 5.1 [87] .....	34
<b>Figura 5.4</b> Poziția simulată pe axa z a pozitronilor emiși de $^{48}\text{V}$ cu grosimea de $-1\mu\text{m}$ și implantați în -W [87] .....	35
<b>Figura 5.5</b> Frația totală moderată simulată de $e^+$ și intensitatea inițială estimată de $e^+$ pentru o activare de 8 ore a foliei sursă în funcție de grosimea foliei sursă [87] .....	35
<b>Figura 5.6</b> Frația totală $e^+$ moderată simulată în funcție de grosimea foliei de moderare în cazurile de grosime a foliei sursă de 1 și 10 $\mu\text{m}$ . [87] .....	36
<b>Figura 5.7</b> Camera de vid și magnetii asamblați împreună. Axele de măsurare a câmpului magnetic .....	37
<b>Figura 5.8</b> Instalația experimentală capcană magnetică cu cruce de analiză echipată cu doi detectori de $\text{CeBr}_3$ .....	37
<b>Figura 5.9</b> Camera capcanei magnetice asamblată împreună cu rama pe care sunt poziționate foliile și grila .....	39



# Lista de tabele

<b>Tabelul 2.1</b> Parametrii de bază ai unor semiconductori avansați .....	9
<b>Tabelul 4.1.</b> Densitatea totală a defectelor, lungimile de corelație a defectelor și lungimile efective de difuzie a pozitronilor în GaN, unde $d$ este grosimea stratului, $pdt$ este densitatea totală a dislocațiilor de tip șurub, $r_d$ este distanța medie dintre două dislocații, $L$ este lungimea de corelație a defectelor (marginile și de tip șurub) și $L_{\text{eff}}$ este lungimea efectivă de difuzie a pozitronilor.....	26
<b>Tabelul 5.1</b> Se calculează raza exterioară, grosimea bobinei, înfășurările pe bobină, curentul maxim și lungimea totală a conductorului. Izolația suplimentară care înconjoară conductorii este inclusă (0,5 mm) în diametrul și grosimea bobinei. Curentul maxim al bobinei trebuie să fie mai mic decât curentul maxim al sursei de alimentare [87] .....	32



# Capitolul 1

## Introducere

Pozitronii sunt utilizați în multe domenii de cercetare și industriale datorită distribuției rapide și largi a energiei. Unul dintre cele mai importante aspecte ale utilizării lor este crearea de fascicule de pozitroni lenti, de energie scăzută (monoenergetici). Aceste fascicule pot fi generate prin scăderea energiei particulelor  $\beta^+$  la câțiva electroni-volți cu ajutorul așa-numiților moderatori. O valoare ridicată a eficienței moderării, definită ca raportul dintre numărul de pozitroni termici eliberați de moderator și numărul de pozitroni de înaltă energie furnizați moderatorului, este o cerință esențială. Gazele rare solide, cum ar fi Ne și Ar, au cele mai mari eficiențe de moderare ( $7 \times 10^{-3}$ ), dar sunt dificil de manipulat și secțiunea transversală a fasciculului de pozitroni nu este la fel de îngustă ca atunci când se utilizează un moderator metalic. Tungstenul este cel mai eficient moderator metalic, cu o eficiență de moderare de aproximativ  $3 \times 10^{-3}$  [1]. O cerință esențială pentru ca un material să fie moderator de pozitroni este ca lucrul de extracție al pozitronului din solid,  $\Phi_+$ , să fie negativ. De exemplu,  $\Phi_{W^+} = -3.0$  eV [2], [3] pentru tungsten și  $\Phi_{Pt^+} = -1.95$  eV [4] pentru platină.

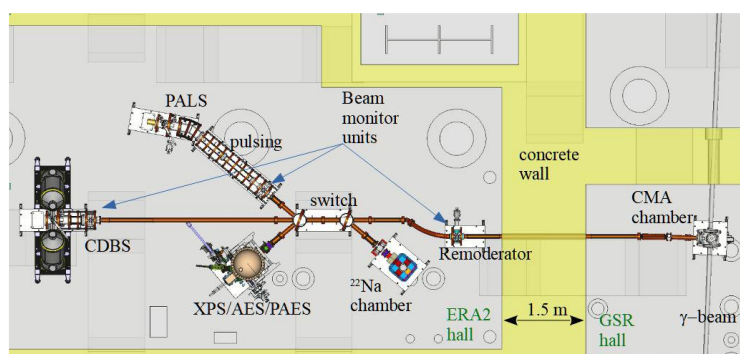
Semiconductorii cu benzi interzise largi sunt atractivi pentru a fi utilizați ca moderatori de pozitroni, deoarece pot absorbi și încetini eficient pozitronii datorită masei lor atomice ridicate și structurii lor atomice dense. De exemplu, GaN și

Noi materiale pentru moderarea de pozitroni

6H- SiC au valori ale lucrul de extracție al pozitronului din solid de  $-2.4 \pm 0.3$  eV și, respectiv,  $-3.0 \pm 0.2$  eV [5], [6].

## A. Motivația științifică

Fasciculul de raze gamma de mare intensitate și luminozitate ridicată care se preconizează a fi produs la ELI-NP ca rezultat al împrăștierii Compton inverse este așteptat să fie un instrument de cercetare esențial. Pentru a evita problemele de activare a materialelor, pentru generarea de  $e^+$  lenți, se va utiliza numai fasciculul gamma operat la o energie scăzută. Este în curs de dezvoltare o nouă linie de fascicule de pozitroni lenți cu trei stații de măsurători experimentale spectroscopice, după cum se arată în Figura 1 [7]. Spectroscopia de anihilare a timpului de viață al pozitronilor (PALS) este o tehnică puternică pentru detectarea defectelor și pentru determinarea dimensiunii (tipului) și a concentrațiilor relative ale defectelor de volum deschis [8]. Spectrometrul de coincidență Doppler a liniei de anihilare (CDBS) constă în două perechi de detectori HPGe, dispuse pentru a detecta în timp și energie condițiile de coincidență pentru razele  $\gamma$  de anihilare de 511 keV [9]. Informațiile obținute sunt vitale pentru determinarea tipului de defecte care sunt prezente în metale și semiconductori [10], [11].



**Figura 1** Dispunerea echipamentelor din laboratorul de spectroscopie cu pozitroni ELI-NP

Corelația Age Momentum (AMOC) este concepută pentru a permite ca detectoarele HPGe să fie mutate pe linia de fascicule PALS și pentru ca fiecare dintre ele să fie setate să funcționeze în coincidență temporală cu detectorul rapid BaF<sub>2</sub> aliniat într-o direcție anti-coliniară [12]. Spectroscopia de electroni Auger indusă de pozitroni (PAES), tehnica complementară la spectroscopia de electroni Auger indusă de electroni (AES),

poate fi utilizată pentru a investiga stratul atomic al unei suprafețe care este exact stratul cel mai de sus al suprafeței [13], [14]. Așa cum Figura 1 arată, fasciculul de pozitroni este creat cu ajutorul fasciculului gamma și va fi moderat prin intermediul ansamblului convertor/moderator (CMA) realizat din tungsten sau platină [15]. Având în vedere că timpul de funcționare a fasciculului gamma va fi limitat de alte experimente de fizică nucleară, soluția de funcționare a laboratorului pe tot parcursul anului va fi alimentarea liniilor de fascicule cu  $e^+$  obținute de la o sursă comercială  $^{22}\text{Na}$ . Indiferent de metoda prin care a fost creat, pentru a modifica energia pozitronului, este necesar un moderator. În acest scop, un moderator în stare solidă trebuie să îndeplinească numeroase cerințe privind structura, dar, în același timp, trebuie să poată avea o gamă de compoziții, fiecare dintre acestea producând o funcție de lucru de extracție al pozitronului din solid distinctă. Studiile au arătat că lungimea de difuzie a pozitronilor este cuprinsă între 200 și 300 nm în semiconductori cu o rețea cristalină ideală și că un câmp electric aplicat poate crește numărul de pozitroni care ajung la suprafață [16].

GaN, semiconductorul cu energia benzii interzise de 3.44 eV, este luat în considerare pentru a fi utilizat ca moderator solid în acest proiect. Structura sa wurtzit  $\alpha$ -hexagonală demonstrează capacitatea realistă de creștere a cristalului în direcții favorizate, cu o nepotrivire minimă a rețelei în comparație cu substraturile tipice (Si,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , SiC) [16],[17]. Cercetările experimentale asupra GaN au arătat o funcție de lucru de extracție al pozitronului din solid de  $2.4 \pm 0.3$  eV, un raport de ramificare a pozitronilor de  $0.48 \pm 0.02$  la suprafață și o lungime de difuzie a pozitronilor de  $19.3 \pm 1,4$  nm [6], proprietăți ce îl fac un moderator de pozitroni adecvat.

Această lucrare a fost motivată de dorința de a construi o nouă formă de moderator în transmisie sau reflexie sau un moderator asistat de câmp electric (FA). Pentru a crea materiale noi pentru moderarea pozitronilor, sunt necesare o calitate ridicată a structurii cristaline și concentrații foarte scăzute de defecte și impurități. Eficiența de conversie a moderatorului este un factor important, iar acest studiu implică și optimizarea unei capcane magnetice în care pozitroni rapizi sunt capturați și care pot interacționa de mai multe ori cu materialul moderator.

## **B. Structura tezei.**

Un rezumat concis al scopului și structurii lucrării, precum și o explicație a metodologiei acesteia este prezentat în capitolul introductiv.

În primul capitol, se face o introducere a elementelor fundamentale ale surselor de pozitroni și se explică rolul pe care îl joacă moderatorii în realizarea fasciculelor de pozitroni. În plus, acolo sunt discutate proprietățile semiconductorilor nitrurați și oxidici, precum și defectele cristaline. Și, în cele din urmă, spre sfârșitul capitolului, este prezentată o introducere în depunerea prin pulverizare magnetron, precum și o prezentare generală a tehnicilor care sunt utilizate pentru a crește materiale prin procese de depunere.

Fabricarea și caracterizarea GaN ca prim strat atunci când este depus pe substrat este prezentată în Capitolul 2. Aici este prezentat un rezumat general al caracterizării țintei și al corelației cu probele care au fost crescute. Următoarea secțiune a acestui capitol este dedicată depunerii și caracterizării diferitelor materiale care pot fi utilizate ca straturi tampon.

În Capitolul 3, analiza măsurătorilor în experimente cu pozitroni este furnizată împreună cu rezultatele unei investigații a unor probe de GaN produse epitaxial.

În capitolul 4 este prezentată o discuție cuprinzătoare privind optimizarea și producția unui dispozitiv de moderare a pozitronilor bazat pe o capcană magnetică. În această secțiune, experimentul care a fost realizat de Gerchow și colab. [18] este urmat pentru a oferi o imagine de ansamblu a dispozitivului optimizat. În plus, sunt discutate dezvoltarea bobinelor magnetice care susțin capcana magnetică, proiectarea camerei, construcția dispozitivului experimental, iradierea foliilor, recoacerea moderatorului și rezultatele experimentale.

Un rezumat al studiului, inclusiv rezultatele și perspectivele acestuia, este prezentat în ultimul capitol al documentului.

# Capitolul 2

## Aspecte teoretice

### 2.1 Surse de pozitroni. Moderatori de pozitroni

Cele mai frecvent utilizate surse  $\beta^+$  în spectroscopia cu pozitroni sunt  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{58}\text{Co}$ ,  $^{64}\text{Cu}$  and  $^{68}\text{Ga}$  [19]. Studiile recente sunt axate pe dezvoltarea de fascicule de pozitroni lenți de mare intensitate, prin producerea de perechi electron-pozitron cu ajutorul unor raze gamma puternice. Perechile sunt create prin interacțiunea razelor gamma cu energii mai mari de 1022 keV cu câmpul electric al nucleului sau, deși șansa este minimă, cu cel al unui electron [20]. Singura diferență în noțiunea de generare de pozitroni prin formarea perechilor este mecanismul de producere a razelor gamma de înaltă energie. Sursa de pozitroni indusă de neutroni MUnICH (NEPOMUC) din Germania este cea mai puternică sursă de pozitroni din lume. Aceasta utilizează reacția nucleară  $^{113}\text{Cd} (n, \gamma) ^{114}\text{Cd}$  pentru a crea cuante gamma de mare energie după capturarea termică a neutronilor [21]–[23]. Spre deosebire de NEPOMUC, reactorul de cercetare din Delft, Olanda, exploatează fluxul de radiații gamma produs de procesul de fisiune în miezul reactorului nuclear [24]. Cea de-a treia și cea mai frecvent utilizată tehnică este sursa de pozitroni bazată pe LINAC, care utilizează radiații bremsstrahlung de mare energie pentru a forma o pereche electron-pozitron într-un material cu Z ridicat [25], [26].

Noi materiale pentru moderarea de pozitroni

Pozitronii pot fi, de asemenea, generați de fascicule gamma cu energie mare, care sunt produse prin împrăștierea Compton inversă a fotonilor cu electroni [15], [27]. Aceasta este o altă metodă de producere a pozitronilor care este planificată a fi implementată la Extreme Light Infrastructure - Nuclear Physics (ELI - NP), facilitate situată în România [15].

Este necesar un material (convertor) cu o sarcină nucleară ridicată  $Z$ , cum ar fi W, Ta sau Pt, pentru ca o conversie a perechilor gamma-pozitron-electron să aibă loc în mod eficient. Secțiunea transversală,  $(\sigma_{e^-e^+})$  este următoarea:

$$\sigma_{e^-e^+} = Z^2 f(E_\gamma, Z), \quad 2.1$$

unde  $f(E_\gamma, Z)$  este o funcție care depinde de energia razelor gamma ( $E_\gamma$ ) și de numărul atomic al materialului țintă.

Astfel, probabilitatea de formare a perechilor este direct proporțională cu energia gamma,  $E_\gamma$ , și cu numărul atomic pătratic al materialului, dar așa cum s-a observat în montajul experimental planificat în Ref. [15] și optimizat așa cum este descris în Ref. [28], la valori ridicate  $Z$ , secțiunea eficace și, implicit, generarea de  $e^-e^+$  crește, dar eficiența de moderare a pozitronilor scade. Prin urmare, pentru o producție optimă de pozitroni lenți, ansamblul convertor-moderator (CMA) urmărește compromisul dintre designul geometric și alegerea materialului de moderare.

Aceasta cercetare, se va concentra pe dezvoltarea fasciculelor de pozitroni lenți - monoenergetice. Este important de menționat că termenii fascicul de pozitroni lenți, moderați sau de joasă energie sunt utilizați ca sinonime cu sintagma fascicul de pozitroni lenți – monoenergetic [20]. Fasciculele de pozitroni lenți sunt utilizate pentru a face diferența între informațiile furnizate de suprafață/sub-suprafață și volumul, permițând studierea straturilor care au o grosime de doar câteva zeci de nanometri și a anumitor proprietăți de suprafață.

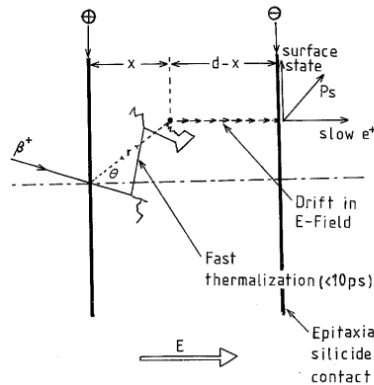
Procesul prin care pozitronii interacționează într-un volum de gaz sau de solid este similar. Diferența fundamentală constă în faptul că în gaze nu există excitarea modurilor colective, cum ar fi plasmonii sau fononii, datorită lipsei de corelație pe distanțe lungi. În așteptarea dezvoltării unor materiale sustenabile pentru moderare, s-au efectuat experimente cu folii acoperite, precum și cu alte materiale și geometrii, astfel cum se descrie în [29]–[31].



Pe lângă criteriile menționate în Introducere, în cazul materialelor semiconductoare, moderarea poate fi îmbunătățită prin aplicarea unui câmp electric, care conferă o viteză de drift pozitronilor. Această moderare FA se bazează pe ideea că pozitronii termalizați vor fi mutați în interfața de vid și vor fi emiși spontan [32]. Ecuația de difuzie a fost rezolvată de Beling și colab. [33] pentru un moderator din Si (a se vedea Figura 2.1), și au obținut formule pentru fracția de pozitroni care se îndepărtează de barierele plasate la  $x = 0$  and  $x = d$ . În situația unui câmp electric mare, când viteza de drift este  $v(E) \gg \sqrt{D^+ \tau}$ , unde  $D^+$  este constanta de difuzie a pozitronilor și  $\tau$  reprezintă durata de viață a pozitronilor, astfel  $\sqrt{D^+ \tau}$  reprezintă coeficientul de difuzie a pozitronilor, componentele de difuzie pot fi ignorate, iar ecuația care descrie fracția de  $e^+$  care atinge  $x = d$  este după cum urmează:

$$x(d) = \frac{\tau \alpha v(E) e^{\alpha d} - e^{-v(E)\tau}}{1 - \tau \alpha v(E)} \quad . \quad 2.2$$

Reprezentarea schematică a profilului de implantare a pozitronilor utilizat în calculele teoretice pentru moderarea FA este prezentată în Figura 2.1. Pozitronul care a fost termalizat în poziția  $(r, \theta)$ , reprezentată de adâncimea  $x = r \cos \theta$ , în decurs de 10 ps urmează direcția câmpului  $E$  aplicat, ajungând în cele din urmă la un contact epitaxial subțire de siliciu ( $20 \text{ \AA}$ ) și fiind emis în vid.



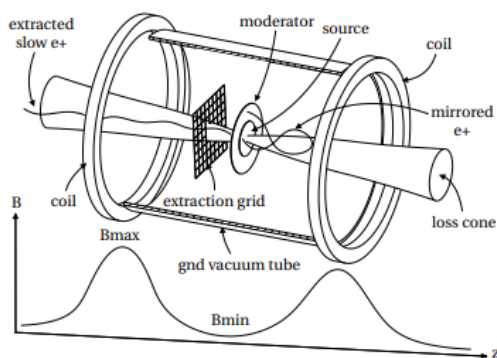
**Figura 2.1** Diagrama schematică de moderare FA a unui moderator de siliciu din ref. [33]. Pozitronul se termalizează până la o poziție  $(r, \theta)$  în 10 ps la o adâncime de implantare de  $x = r \cos \theta$ . Acesta urmează apoi direcția câmpului  $E$  aplicat, ajungând în cele din urmă la un contact subțire de siliciu ( $20 \text{ \AA}$ ) și fiind emis în vid

În cele din urmă, Beling și colab. [33] au demonstrat că FA-Si prezintă multe avantaje, unul dintre acestea fiind autoportanța în vid. De asemenea, au arătat că un strat de siliciu ( $\text{NiSi}_2$ ,  $\text{PtSi}$ , etc.) poate fi utilizat pentru a facilita contactele pentru

Noi materiale pentru moderarea de pozitroni

câmpul electric. Câțiva ani mai târziu, o cercetare teoretică a fost întreprinsă de Beling și colab. [34] în care au stabilit că emisia de pozitroni este favorizată de unii semiconductori precum GaN, GaP, ZnSe, SiC etc.

De asemenea, au fost efectuate experimente în câmpuri electrice și magnetice cu scopul de a îmbunătăți eficient moderarea pozitronilor [35]–[37]. Gerchow și colab. [18] au publicat dezvoltarea unei capcane magnetice care îmbunătățește eficiența moderării W cu 1,8(2)%. Proiectarea dispozitivului de tip sticlă magnetică este prezentată în Figura 2.2. Acest dispozitiv se bazează pe ideea că pozitronii rapizi de la o sursă sunt capturați de câmpul magnetic și sunt supuși unor treceri multiple prin foliile sursei și ale moderatorului, crescând astfel șansele de a fi moderați.



**Figura 2.2** Dezvoltarea unui dispozitiv capcană magnetică de Gerchow și colab. [18], conceput cu două folii de Ti iradiat (*sursă*), o folie de W (110) ilustrată ca *moderator* și o grilă de extracție plasată în interiorul unei capcane magnetice. Pozitronii sunt confinați și își pierd energia prin treceri multiple prin foliile moderatoare. Grila de extracție este menținută la potențialul de masă pentru a maximiza eficiența pozitronilor moderați.

## 2.2 Materiale pe bază de nitruri și oxizi. Defecte cristaline

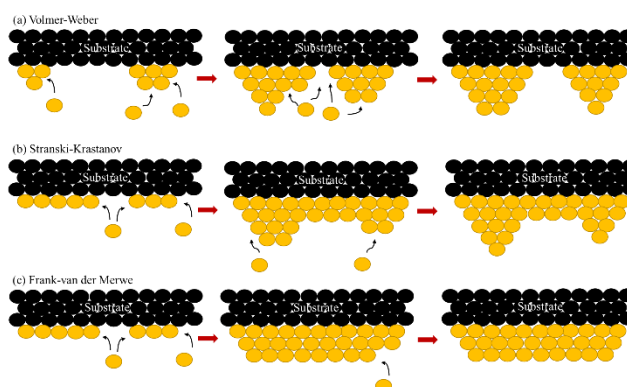
După inventarea tranzistorului în 1948 [38], interesul pentru dezvoltarea tehnologiei siliciului a crescut odată cu succesul electronicii. Cu toate acestea, semiconductorii nitrurați și oxidici au câștigat importanță datorită cerințelor enorme privind proprietățile lor specifice. Un motiv esențial pentru acest interes este banda interzisă largă și directă (0,7 eV InN, 3,4 eV GaN, 6,2 eV AlN [39], [40]) reglabilă

în mod continuu prin modificări ale concentrației de dopaj. Tabelul 2.1 sintetizează unele dintre proprietățile acestor materiale și structura lor cristalină.

**Tabelul 2.1** Parametrii de bază ai unor semiconductori avansați

Structura	AlN	InN	GaN	ZnO	TiN
$a$ [Å] / $c$ [Å]	3.112/4.982	3.548/5.760	3.189/5.185	3.2495/5.2069	4.241
Densitate [g/cm <sup>3</sup> ]	3.255	6.81	6.095	5.606	5.21
Punct de topire [°C]	2500	1100	1600	1974	2947
Banda interzisa [eV]	6.2	0.7	3.4	3.3	3.4
Structura cristalina	wurtzite	wurtzite	wurtzite	wurtzite	cubic

Depunerea semiconductoarelor nitrurate/oxidice reprezintă o provocare din cauza dificultăților tehnice legate de prelucrarea și creșterea acestor materiale. Primii pași constau în alegerea materialului și în transportul acestuia pe substratul ales. Ulterior, urmează condensarea particulelor. Contaminanții, structura cristalină etc. de pe suprafața substratului influențează în mod direct rata de depunere. Există trei tipuri diferite de moduri de creștere pentru filmele subțiri [41], [42], care sunt reprezentate în Figura 2.3.

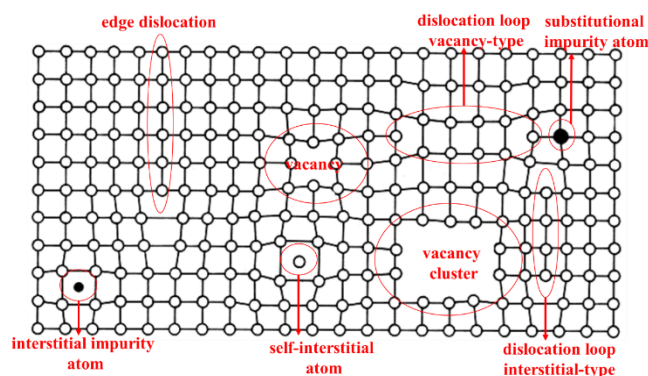


**Figura 2.3** Moduri de creștere. (a) Creșterea Volmer-Weber; (b) Creșterea Stranski-Krastanov; (c) Creșterea Frank-van der Merwe [43]

Proprietățile fizice și chimice finale ale noului material sunt puternic influențate de substratul ales. Parametrul de nepotrivire film-substrat este primul criteriu, iar

substraturile cu discrepanțe substanțiale în ceea ce privește proprietățile fizice cresc concentrația dislocațiilor de filetare, tensiunea straturilor de creștere și nepotrivirea. S.A. Kukushkin și colab. trec în revistă cele mai utilizate substraturi pentru epitaxia GaN [44], și au raportat o asimetrie de 16% între safir și nitrura de galiu, un coeficient de conductivitate termică de 0,25 Wt/cmK la 100 °C, o concentrație mare de dislocații de nepotrivire ( $10^{10}\text{cm}^{-2}$ ) și o tensiune de compresiune biaxială care apare la răcire datorită coeficientului de dilatare termică al  $\text{Al}_2\text{O}_3$  care este mai mare decât cel al GaN. Nitrurarea suprafeței substratului Si duce la o scădere semnificativă a densității de dislocații, iar depunerea câtorva mono-straturi de Al ca tampon după nitrurare scade bariera de nitrurare [44].

Defectele, așa cum sunt induse în procesul de depunere, sunt aranjamente de atomi care conțin imperfecțiuni care au un efect profund asupra comportamentului proprietăților materialelor, așa cum se vede în Figura 2.4. Aceste defecte pot fi clasificate în defecte 0-dimensionale (0D) sau defecte punctiforme, defecte liniare (1D), defecte plane (2D), defecte de graniță, defecte gemene, defecte de stivuire și defecte de volum (3D). Dislocarea de margine este un tip de defect de linie în rețelele cristaline, în care defectul rezultă fie din prezența unui alt plan atomic, fie din pierderea unei jumătăți de plan atomic în mijlocul rețelei. Atunci când se aplică o tensiune unui cristal cu acest defect, zona de dislocare se deplasează paralel cu direcția tensiunii, dar mișcarea în regiunea în care apare o jumătate de plan atomic este extrem de redusă în comparație cu regiunea în care lipsește cealaltă jumătate a acelui plan atomic. Acest defect poate aluneca în orice plan [45].



**Figura 2.4** Mai multe tipuri de defecte de rețea [46]

Celălalt tip de defect de linie este dislocarea de tip șurub, care apare atunci când planurile atomilor din rețeaua cristalină urmează o traiectorie elicoidală în jurul

liniei de dislocare. Spre deosebire de o dislocare de margine, atunci când se aplică o tensiune pe un cristal care conține acest defect, zona de dislocare se deplasează perpendicular pe direcția tensiunii. Cu toate acestea, tensiunea cauzată de dislocațiile de șurub este comparativ mai puțin complexă decât cea a dislocațiilor de muchie.

## **2.3 Depunerea de filme subțiri. Pulverizare magnetronică**

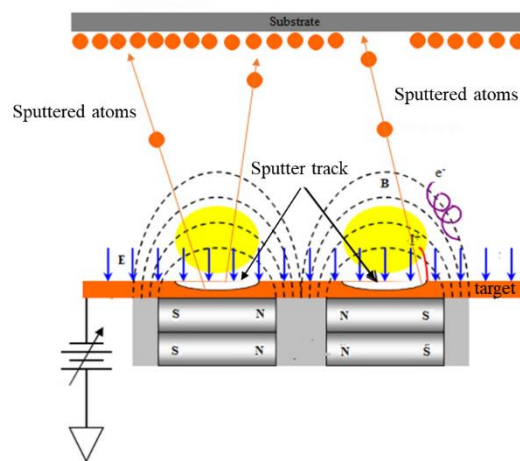
Domeniul de cercetare a filmelor subțiri a dezvoltat diverse metode de depunere și creștere, care pot fi clasificate ca procese fizice și chimice. Primul include depunerea fizică în stare de vapori (PVD), cum ar fi pulverizarea, ablația cu laser etc., în timp ce depunerea chimică în stare de vapori (CVD), cum ar fi depunerea organo-metalică etc., face parte din procesul chimic. Prin metoda PVD, peliculele subțiri sunt depuse prin condensarea pe suprafața substratului a materialului evaporat dintr-un material țintă. În prezent, unele dintre metodele utilizate în mod obișnuit pentru creșterea GaN sunt epitaxia în fază de vapori metal-organici (MOVPE) [47], epitaxia cu fascicule moleculare (MBE) [48], și pulverizarea magnetronică [49]. Pulverizarea magnetronică este metoda PVD aplicată pentru depunerea de filme subțiri descrisă în această teză de cercetare. Plasma gazoasă este utilizată pentru a eroda suprafața țintei, urmată de mișcarea atomilor prin vid și depunerea lor pe substrat.

Sursele magnetronice au fost create în anii 1970 și reprezintă o îmbunătățire considerabilă a eficienței tehnicii de pulverizare. Se utilizează câmpuri magnetice puternice, în principal de la magneți permanenți, pentru a restricționa electronii secundari în apropierea suprafeței țintei, ceea ce duce la o ionizare mai puternică a atomilor din gazul de pulverizare, la o rată de depunere mai mare și la o plasmă densă [50]. Câmpul electric puternic generat de tensiunea aplicată la catod într-o sursă de pulverizare magnetronică accelerează electronii secundari în direcția normală la suprafața țintei. Câmpul magnetic este proiectat pentru a se alinia într-o direcție paralelă cu suprafața țintei, așa cum se arată în Figura 2.5, determinând

Noi materiale pentru moderarea de pozitroni

electronii să se deplaseze pe traiectorii cicloidale. Acest lucru duce la o creștere a curenților de plasmă și la ionizarea prin coliziune a atomilor din gazul de pulverizare, care se condensează pe un substrat sub forma unui film subțire.

Curentul continuu (DC), curentul continuu pulsant, frecvența radio (RF) și pulverizarea magnetronică cu impulsuri de mare putere sunt câteva dintre modurile care pot fi utilizate pentru a obține cele mai bune rezultate posibile. În plus, în plasmă se poate adăuga un gaz reactiv (azot, oxigen, hidrocarburi, sulf etc.), care trece apoi printr-o reacție chimică înainte de a se depune pe eșantion. Acest proces este cunoscut sub numele de pulverizare reactivă și permite producerea unui compus între materialul țintă și gazul reactiv.

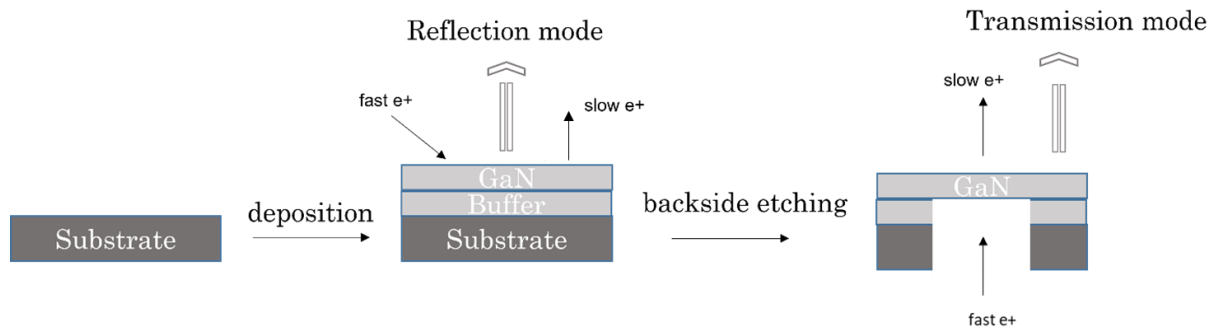


**Figura 2.5** Schema procesului de pulverizare magnetronică

# Capitolul 3

## Moderator. Fabricare și caracterizare

Obiectivul de a crea un nou moderator în mod de transmisie sau de reflexie sau un moderator asistat de câmp electric, a condus această cercetare. O schemă completă a etapelor urmate pe parcursul cercetării descrise în această teză este prezentată în Figura 3.1. Publicațiile actuale privind producția de filme de GaN relevă faptul că filmele heteroepitaxiale de GaN sunt dezvoltate pe o varietate de substraturi [51], [52]. În special, substraturile alese pentru această cercetare sunt Si, TiO<sub>2</sub>, ZnO, și Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Înainte de depunere, substraturile au fost curățate cu prin băi cu ultrasunete de 10 minute în izopropanol, acetonă și apă ultrapură, recoapte la 700° C și investigate prin diferite tehnici, cum ar fi difracția de raze X (XRD), microscopia electronică cu scanare (SEM), spectroscopie cu raze X cu dispersie de energie (EDS), microscopie electronică ptin transmisie (TEM), microscopie cu forță atomică (AFM), profilometrie optică (OP) și spectroscopie fotoelectronică cu raze X (XPS) pentru a vedea caracteristicile de suprafață și de volum.



**Figura 3.1** Diagramă pas cu pas care arată fabricarea moderatorului de pozitroni

### 3.1 Experimental setup

Clusterul de depunere UHV (vid ultra-înalt) din cadrul ELI-NP Targets Laboratory a fost utilizat pentru a dezvolta filme subțiri. Acesta dispune de trei camere de vid principale: i) camera loadlock, în care se poate efectua gravare cu ioni de Ar; ii) camera de pulverizare dedicată metalelor și; iii) camera dedicată oxizilor.

Înainte de experiment, unele aspecte necesită o cercetare exhaustivă în literatura de specialitate. Pe lângă caracteristicile țintei de pulverizare și materialul adecvat pentru substrat, există și alți parametri specifici ai echipamentului, cum ar fi regimul de funcționare (DC/RF), distanța dintre țintă și substrat, înclinarea magnetronului, atmosfera de gaz, puterea de pulverizare, presiunea de lucru, temperatura substratului și rotația acestuia, care ar trebui adaptate la experimentul dorit.

Profilul de vid al camerei UHV a fost primul factor important monitorizat în timpul fiecărei depuneri. Grosimea peliculelor depuse a fost evaluată cu ajutorul QCM, iar acesta a fost calibrat prin măsurarea grosimii peliculei rezultate cu ajutorul reflectivității razelor X (XRR). A fost studiată temperatura reală a substratului și comportamentul acestuia în timpul depunerii. În plus, au fost monitorizați parametrii plasmii și ai țintei. Tensiunea de curent continuu (DCV) monitorizează stabilitatea profilului plasmii și este utilizată pentru feedback-ul de reglare a puterii pentru unitatea RF. Variațiile rezistenței suprafeței țintei sunt adesea indicate de puterea reflectată.

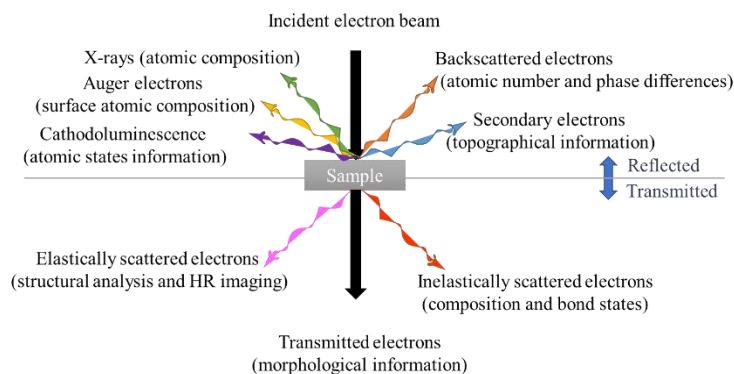


Acest studiu nu acoperă încercările nereușite sau defecțiunile echipamentului, contaminarea atmosferică, depunerile întrerupte, repetițiile, seturile de depunere cu mici modificări, dificultățile de configurare care au dus la pierderea vidului *etc.*

## 3.2 O scurtă introducere în metodele de caracterizare.

Probele rezultate au fost analizate atât la suprafață, cât și în volum. XRD a fost utilizată pentru a caracteriza microstructura probelor. Ideea fundamentală care stă la baza acestei metode este legea difracției a lui Bragg  $n\lambda = 2d_{hkl} \sin\theta$ , unde  $n$  este un număr întreg,  $d_{hkl}$  este distanța dintre planurile atomice,  $\lambda$  este lungimea de undă a razelor X și  $\theta$  este unghiul de difracție. Atunci când un fascicul colimat de raze X este incident pe un cristal, razele X interacționează cu atomii din rețeaua cristalină și sunt împrăștiate în diferite direcții. Nu există nicio dovadă a vârfurilor de difracție până când nu este îndeplinit criteriul pentru interferența constructivă,  $\delta = n\lambda$  [53]. A fost utilizat un difractometru Rigaku SmartLab, caracterizat printr-un goniometru cu patru cercuri cu un braț în plan, un anod rotativ de 9 kW, un detector hibrid multidimensional (0D, 1D, 2D) cu pixeli HyPix 3000, o zonă de microfocalizare de 0.4 mm<sup>2</sup>, opțiuni SAXS (Small-Angle X-ray Scattering) și USAXS (Ultra Small-Angle X-ray Scattering), monocromatoare Ge (220) pe optica de incidență și de recepție.

SEM, împreună cu EDS și difracția de retrodifuzie a electronilor (EBSD) pot fi utilizate pentru a determina compoziția chimică, textura (morfologia externă), structura cristalină și orientarea materialului din compoziții probei. Tehnica SEM este bazată pe interacția între un fascicul de electroni focalizat și o probă. După cum se arată în Figura 3.2 (partea reflectată), atunci când un fascicul de electroni lovește o sondă groasă se produc trei tipuri de electroni (SE-electroni secundari, electroni Auger și BSE-electroni retrodifuzivi), raze X și catodoluminescență. Pentru obținerea de imagini ale probelor, se utilizează electroni retrodifuzivi și electroni secundari, adică BSE demonstrează diferența de compoziție în probele multifazice, în timp ce SE dezvăluie topografia și morfologia materialelor. În realitate, imaginea este o hartă de distribuție a intensității semnalului emis de regiunea scanată [54].



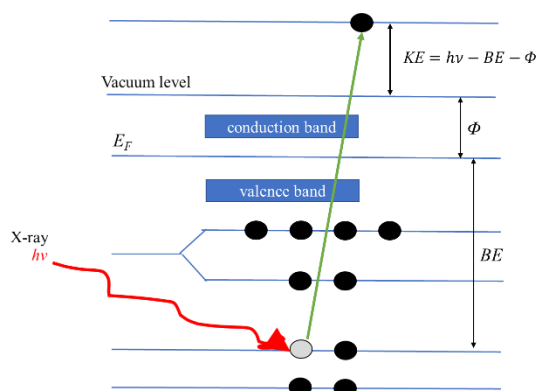
**Figura 3.2** Rezumat al diferitelor semnale obținute prin interacțiunea electronilor cu materia

Măsurătorile au fost efectuate cu ajutorul unui SEM de înaltă rezoluție (HR-SEM) Tescan MAIA-3. Analiza elementară și chimică, cartografierea și scanarea liniară a probelor au fost efectuate cu ajutorul EDS integrat în camera HR-SEM. În plus față de SEM, TEM oferă informații despre aranjamentul atomilor din probă și despre defectele din structura cristalină. În comparație cu tehnica SEM, care colectează electronii deviați care lovesc proba, TEM dezvăluie informații după ce electronii sunt transmiși printr-un eșantion subțire, după cum se arată în Figura 3.2. Structura cristalină a probelor a fost analizată cu ajutorul unui microscop Titan Themis 200 corectat cu Cs (Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, SUA) proiectat cu o sursă de electroni de mare luminozitate. Profilarea liniilor elementare a fost realizată cu ajutorul unui detector STEM și al unui detector Super-X EDS pentru difracția electronică de suprafață selectată (SAED). Prelucrarea datelor EDS a fost realizată cu ajutorul software-ului ImageJ [55], în timp ce SingleCrystal® (Oxford, Regatul Unit) și CrystalMaker® (Oxford, Regatul Unit) au fost utilizate pentru simularea datelor SAED și a structurilor cristaline [56].

În plus, au fost efectuate investigații topografice cu ajutorul AFM și OP (profilometrie optică). Există trei moduri de măsurare disponibile pe AFM. (i) Modul de contact sau modul static: Sonda se află în apropierea suprafeței probei și nu oscilează; (ii) Un mod în care sonda nu este în contact cu proba (mod fără contact sau dinamic). Sonda oscilează pe suprafața probei fără a intra în contact cu suprafața; și (iii) Modul de atingere, semi-contact sau contact intermitent: În partea de jos a oscilației sondei, vârful intră în contact strâns cu suprafața probei [57]. În schimb, profilometria optică exploatează mai degrabă lumina decât o sondă fizică.

Acest lucru poate fi realizat în mai multe moduri. Cheia acestei tehnici este redirecționarea luminii astfel încât să poată detecta suprafața în trei dimensiuni. Printre exemple se numără interferența optică, utilizarea deschiderii confocale, focalizarea și detectarea fazei și proiecția unui model pe o imagine optică [58]. Imaginile AFM au fost înregistrate de microscopul cu sondă de scanare NTEGRA, în timp ce caracterizarea profilării suprafeței cu imagini 3D și profile 2D a fost colectată prin metoda interferometrică cu ajutorul specificului DI 50× obiectiv al profilometrului optic SENSOFAR S-neox.

Spectroscopia de fotoelectroni produși de raze, XPS, este metoda utilizată în această cercetare pentru determinarea compoziției chimice a suprafețelor probelor (de la 1 la 5 nm). O radiație cu raze X de energie constantă (în practică, se utilizează radiația de excitație  $K_{\alpha}$  emisă de anodul de Al cu 1486,7 eV sau Mg cu 1253,6 eV) excită electronii din învelișurile atomilor constituenți ai probei, care sunt apoi emiși ca electroni liberi cu energie cinetică ( $KE$ ) egală cu diferența dintre energia radiației de excitație ( $h\nu$ ), energia de legătură ( $BE$ ) și funcția de lucru a electronilor din material [59]. Diagrama efectului fotoelectric în XPS este prezentată în Figura 3.3.  $KE$  măsurată furnizează analiza elementară datorită  $BE$  specific pentru un număr de sarcină dat. Spectrometrul fotoelectronic Sigma Surface Science a fost utilizat pentru înregistrarea spectrelor XPS. Acest echipament utilizează un analizor de energie emisferic de 160 mm cu un detector 1D (ASPECT) și o sursă de raze Al  $K_{\alpha}$ /Mg  $K_{\alpha}$



**Figura 3.3** Diagrama efectului fotoelectric în XPS

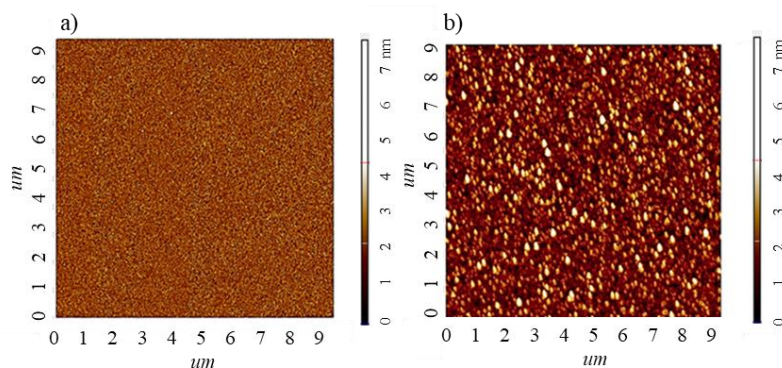
### 3.3 Depuneri de nitrură de galiu

Țintele care au fost utilizate în această cercetare sunt ținte GaN disponibile în comerț. Prima țintă policristalină, notată în continuare ca  $T_{\text{GaN-Pa}}$ , a fost achiziționată de la American Elements. Ultimele două ținte au fost cumpărate de la SurfaceNet GmbH, una ca GaN policristalin, notată ca  $T_{\text{GaN-Pb}}$ , și una monocristalin, notată ca  $T_{\text{GaN-M}}$ . Înainte de procedura de pulverizare, fiecare țintă utilizată pentru depunerea de GaN a fost supusă unor măsurători XRD și HR-SEM/EDS pentru a obține o imagine clară a structurii cristaline, a orientării și a compoziției chimice.

Utilizând clusterul de depuneri în vid ultra-înalt (UHV), au fost depuse filme subțiri de GaN prin pulverizare magnetron cu frecvență radio (RF). Pentru depuneri au fost utilizate substraturi de Si,  $\text{TiO}_2$ , ZnO și  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Înainte de depunere, substraturile au fost curățate, așa cum s-a explicat anterior în acest capitol. Mai mult, acestea au fost fixate cu pastă de argint pe suportul de probe, apoi au fost încălzite la  $100^\circ\text{C}$  timp de 20 de minute pentru a evapora solventul pastei de argint. Pentru a elimina orice impuritate reziduală, probele au fost recoapte timp de 1-2 ore la  $300\text{-}550^\circ\text{C}$  în vid ( $\sim 10^{-6}$  mbar). Parametrii pentru depunerea GaN includ o presiune de lucru ( $P_d$ ) între  $8 \times 10^{-3}$  până la  $1,15 \times 10^{-2}$  mbar, care este compusă dintr-un amestec de argon și azot în volumul de plasmă. Temperatura substratului a fost stabilită de la  $450^\circ\text{C}$  la  $700^\circ\text{C}$ , iar distanța acestuia ( $d_{ts}$ ) față de țintă a fost stabilită la 10-20 de centimetri. Magnetronul a funcționat la o putere ( $P_s$ ) cuprinsă între 50 și 100 de wați, iar o procedură de prepulverizare, care avea ca scop curățarea țintei, a fost efectuată timp de 30 de minute, în timp ce obturatorul din fața substratului era închis. În plus, ținta GaN a fost pulverizată cu RF pentru o perioadă ( $t$ ) cuprinsă între 30 și 90 de minute pentru depunere. După ce depunerea a fost finalizată, încălzirea probei a fost oprită, iar proba a fost lăsată să revină la temperatura ambiantă în timp ce era încă în camera de depunere.

Reflectivitatea razelor X (XRR) a fost aplicată pentru a evalua numeroase caracteristici ale filmelor, cum ar fi structura stratificată, densitatea, informații privind grosimea interfețelor și grosimea filmului, care a fost, de asemenea, utilizată pentru calibrarea QCM.

Caracterizarea AFM ex-situ, care a fost efectuată în modul semi-contact, a arătat modul de creștere. Acest tip de creștere este caracterizat de insule 2D pentru R1/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, R2/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, și R4/ZnO, și trecerea la o creștere 3D pentru R3/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, R5/ZnO și R6/TiO<sub>2</sub>. Imaginile AFM ale filmelor subțiri și groase de GaN produse pe un substrat de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> sunt prezentate în Figura 3.4.



**Figura 3.4** Imagini AFM ale filmelor de GaN cu grosimi diferite crescute pe substrat de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (a) film subțire, (b) film gros

Investigațiile SEM-EDS au fost necesare pentru a evalua clar morfologia suprafeței și compoziția elementară calitativă a filmelor. Examinarea SEM a evidențiat suprafețe netede, uniforme, fără fisuri, cu o morfologie omogenă la o scară de câțiva micrometri.

Pentru o analiză mai precisă a suprafeței, au fost efectuate măsurători XPS, în intervalul de energie de legătură 0-1200 eV. Raportul obținut a fost de aproximativ Ga<sub>1</sub> N<sub>3</sub> O<sub>2</sub> pentru toate probele T<sub>GaN-Pa</sub>. Acest comportament a fost atribuit răcirii probelor în atmosferă de azot de la temperatura de depunere la temperatura camerei, ceea ce a dus la nitrurarea suprafeței. Această ipoteză este susținută și de măsurătorile EDS ale filmelor de GaN, care arată rapoarte Ga:N contradictorii cu rezultatele XPS. Raportul Ga:N obținut pentru probele T<sub>GaN-Pb</sub> a fost de aprox. Ga<sub>1</sub> N<sub>0.9</sub>, în timp ce probele T<sub>GaN-M</sub> prezintă un raport Ga:N de aprox. 1:1. De asemenea, rezultatele EDS reflectă aceste rapoarte pentru filmele GaN obținute cu țintele T<sub>GaN-Pb</sub> și T<sub>GaN-M</sub>.

În plus, unele dintre probe au fost investigate structural prin TEM. Interfața prezintă defecte, cum ar fi dislocări liniare și defecte punctiforme. La suprafața substratului, probele manifestă o microstructură dezordonată care are ca rezultat o densitate mare de defecte de dislocație care se găsesc în interiorul filmului policristalin.

În concluzie, filmele depuse sunt corelate cu compoziția chimică a țintelor de GaN. Au fost implicați diferiți parametri de depunere în încercarea de a obține un film

Noi materiale pentru moderarea de pozitroni

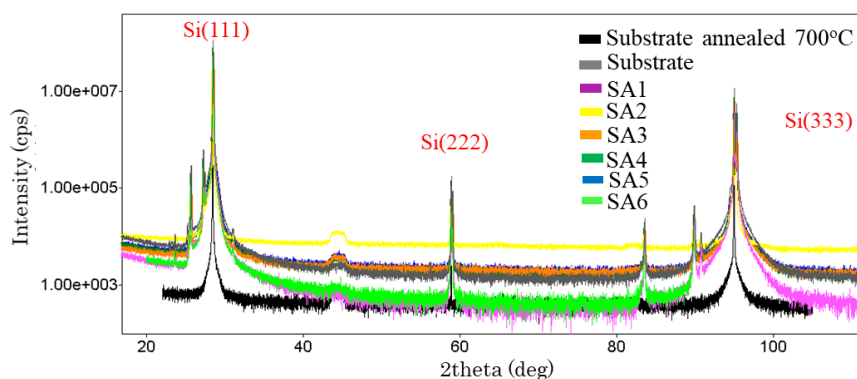
de GaN fără defecte. S-au observat descărcări luminoase instabile și sporadice atunci când raportul Ar:N<sub>2</sub> utilizat a fost de 10% Ar - 90% N<sub>2</sub> și 40% Ar - 60% N<sub>2</sub>. S-a descoperit că o atmosferă cu o compoziție de 70% N<sub>2</sub> și 30% Ar ar avea un raport Ga:N aproximativ de 1:1 și un conținut de oxigen semnificativ mai mic.

## 3.4 Strat tampon

Literatura de specialitate arată că este necesar un strat tampon între substrat și filmul de GaN pentru a ajuta la relaxarea filmului de la tensiunile care pot apărea în timpul creșterii, cauzate de nepotrivirea rețelei cristaline [60], [61].

### 3.4.1 Nitrură de aluminiu (AlN)

Urmând aceeași procedură de curățare ca și cea utilizată pentru depunerea filmelor de GaN, s-au făcut eforturi pentru a crea un strat tampon de AlN folosind o țintă de Al de 1 inch. Aceste încercări au fost întreprinse pe substraturi Si (111). În Figura 3.5 sunt prezentate scanările 2-theta ale probelor SA1 (violet), SA2 (galben), SA3 (portocaliu), SA4 (verde închis), SA5 (albastru), SA6 (verde deschis), un spectru aparținând substratului Si (111) netratat (gri) și un substrat Si (111) tratat la 700°C (negru - măsurători cu monocromator). În aceste spectre nu au putut fi observate semnale aparținând AlN, în schimb, a putut fi observată reflexia (222) a substratului de siliciu. Semnalul înregistrat la ~42° este atribuit semnalului care provine de la suportul de probă din Al.

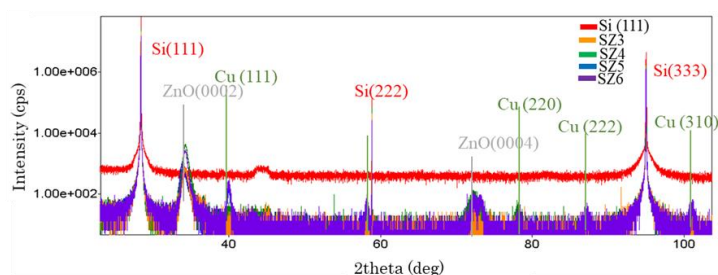


**Figura 3.5.** Scanări XRD 2theta pentru straturile de AlN crescute pe substraturi de Si

### 3.4.2 Oxid de zinc (ZnO)

Se depun eforturi pentru a crea un strat tampon de ZnO prin utilizarea unei ținte de ZnO cu diametrul de 2,54 cm. Așa cum se poate observa în măsurătorile 2-theta din Figura 3.6, toate probele contin un strat de oxid de zinc.

Contaminarea cu cupru a fost găsită în ultimele doua seturi de depunere. Această caracteristică apare ca urmare a unui contact electric defectuos care a topit cuprul situat în partea din spate a țintei (placa de Cu din spate) și l-a evaporat în același timp cu oxidul de zinc. Ca o consecință directă a acestui fapt, depunerile au fost oprite odată ce ținta a fost compromisă.

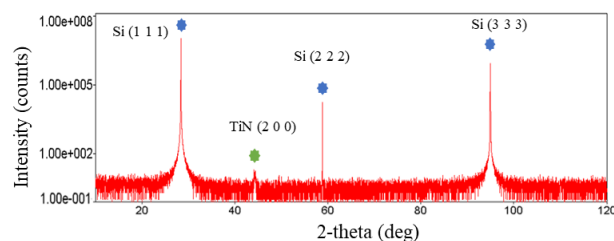


**Figura 3.6** Scanări XRD 2theta pentru straturile de ZnO crescute pe Si

### 3.4.3 Nitrură de titan (TiN)

În mediul de vid, s-au obținut rezultate în producerea de straturi tampon de TiN prin utilizarea unei ținte de titan și a unei atmosfere care constă atât din argon, cât și din azot. Aceste două gaze au fost utilizate în proporții diferite pentru a crea amestecul de gaze adecvat pentru a dezvolta straturi de TiN. Substraturile Si(111) au fost introduse în camera de depunere după ce au fost supuse unor etape identice de curățare și lipire pe suportul de probă, așa cum s-a indicat în studiile anterioare.

De exemplu, Figura 3.7 prezintă rezultatele XRD pentru ST4. Faza TiN identificată în eșantion are o orientare (200). În plus, s-a descoperit că valorile care au fost utilizate pentru ST4 sunt parametrii optimi de depunere.



**Figura 3.7** Scanare XRD 2theta a ST4 care arată TiN (200)

## 3.5 Rezumat

Scopul acestei cercetări a fost de a crea un nou moderator în mod de transmisie sau de reflexie sau un moderator FA. XRD și HR-SEM/EDS au fost utilizate pentru a caracteriza microstructura și orientarea cristalografică a probelor, în timp ce SEM și EDS au fost utilizate pentru a determina compoziția elementară, textura și structura cristalină a compușilor probelor. XPS a fost utilizat pentru a determina compoziția chimică a suprafețelor probelor. Raporturile de grosime și orientările preferate ale GaN și GaN/Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> au fost determinate de grupul spațial al substratului. Stratul tampon de AlN a fost imposibil de realizat din cauza unei ținte de Al puternic oxidat. A fost obținut un strat tampon de ZnO, dar s-a constatat contaminarea cu cupru în ultimele două seturi de depunere. Faza TiN cu orientare (200) a fost obținută prin utilizarea unei ținte de Ti.

Pe baza unei părți din aceste rezultate, a fost redactată și publicată o lucrare în Buletinul Științific al Universității Politehnica din București [62]. Publicarea studiului a fost rezultatul unui efort comun al grupului Departamentul de Știință și Inginerie a Materialelor Oxidice și Nanomaterialelor, UPB, și al Laboratorului de Ținte, ELI-NP.



# Capitolul 4

## Studii asupra probelor de GaN disponibile în comerț

Pe lângă faptul că este un material de perspectivă pentru moderarea pozitronilor [63], [64], nitrura de galiu este un semiconductor important cu bandă interzisă largă, utilizat, de asemenea, în fabricarea dispozitivelor cu heterostructură pe bază de nitrură pentru fotodetectori. [65], electronică [66], [67], diode emițătoare de lumină [68], [69]. În acest sens, înțelegerea structurii de defecte a GaN devine vitală, deoarece orice impurități, defecte de vacante sau tensiuni în structura cristalină pot influența caracteristicile sale fizice și optice unice [66], [70], [71].

### 4.1 Materiale si metode

În prezentul capitol, este prezentat un raport de analiză a calității structurii cristaline a unui film epitaxial de GaN disponibil în comerț, crescut pe 3C-SiC (111) cu un strat tampon intermediar de AlN, împreună cu o analogie cu alte probe de GaN

Noi materiale pentru moderarea de pozitroni

crescute pe substraturi de Si (111) și Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (0001) . Eșantioanele utilizate în acest capitol au fost produse la NTT Advanced Technology Corporation (Kanagawa, Japonia) pentru tranzistori cu mobilitate ridicată a electronilor. Așa cum a fost prezentat și în Ref. [72], [73], condițiile exacte de creștere a filmelor nu au fost puse la dispoziție de către producător. S-au aplicat tehnici complementare pentru caracterizarea materialului în vederea studierii microstructurii, a caracteristicilor interfețelor și a distribuției defectelor. Probele au fost investigate prin HR-TEM, HR-XRD, SEM-EDS și DBS.

## 4.2 Rezultate si discuții

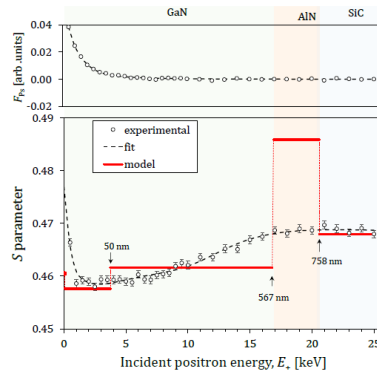
În ceea ce privește determinarea structurii eșantionului straturilor de GaN, au fost efectuate scanări 2theta-omega în afara planului cristalin. S-a confirmat că GaN este o structură hexagonală monocristalină, orientată de-a lungul axei-c și prezentă în toate probele, adică în substraturile Si, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, și SiC. În măsurătorile 2theta-omega în afara planului, au fost observate, de asemenea, reflexiile (0001) ale AlN hexagonal (ICDD 00-025-1133). Scanările omega ale (000*l*) (*l* = 2,4) arată că proba cu cea mai bună calitate (cantitate mai mică de defecte) este GaN/SiC, în timp ce proba cu cea mai slabă calitate (cantitate mai mare de defecte) este GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, care prezintă un FWHM de 0.234°.

Imaginile SEM ale GaN300/Si prezintă o suprafață cu găuri, în timp ce GaN/SiC are o suprafață netedă. În imaginile GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> s-a observat forma hexagonală a GaN, pe marginea probei. Evaluarea imaginilor secțiunii transversale TEM a confirmat stratul tampon de nitrură de aluminiu (AlN), prin urmare, proba GaN/SiC poate fi considerată ca o heterostructură GaN/AlN/SiC. De obicei, un astfel de strat are ca scop reducerea numărului de defecte din filmul de GaN din cauza nepotrivirii reduse a rețelei între AlN și GaN de 2,4 %. [74].

Pentru evaluarea densității dislocațiilor de filetare,  $\rho_d$ , și a lungimii de corelație,  $L$ , au fost efectuate mai multe scanări  $\omega$  pe două axe (rocking curves) pentru planurile cristaline ( $h k l$ ) selectate. Densitățile de dislocații de tip șurub obținute, corespunzătoare stratului de GaN crescut pe SiC, sunt următoarele  $\rho_d^e = 1.37 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  și  $\rho_d^s = 1.07 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ . În consecință, densitatea totală de dislocații de tip șurub

calculată ca sumă a celor două densități componente este  $\rho_d^t = 1.47 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ . Cu această ultimă valoare, distanța medie dintre două dislocații a fost determinată ca fiind de 82 nm, conform  $r_d = 1/(\rho_d^t)^{1/2}$  [75]. Valorile lungimilor de corelație a dislocațiilor, și anume,  $L^e = 171 \text{ nm}$  și  $L^s = 288 \text{ nm}$ , extrase din profilurile peakurilor, pot fi atribuite nepotrivirii reduse a rețelei între substrat și film. Incertitudinea valorilor prezentate se încadrează în cea mai mică cifră semnificativă.

Potrivit Figura 4.1, a fost observată o scădere puternică a  $S$  pentru  $E_+ \lesssim 1 \text{ keV}$  datorită capacității reduse a pozitronilor termalizați de a difuza înapoi spre suprafață. Acest fenomen este indus de câmpul electric local care rezultă din curbarea benzii în apropierea suprafeței. În consecință, la suprafață are loc mai puțină emisie de Ps și, astfel, lungimea de difuzie a pozitronilor este redusă. La  $E_+ \gtrsim 1 \text{ keV}$ ,  $S$  crește încet cu  $E_+$  în zona filmului de GaN, apoi pare să atingă un platou în stratul de AlN (pentru  $E_+ \gtrsim 17 \text{ keV}$ ), înainte de a atinge în cele din urmă saturația completă la  $E_+ \gtrsim 21 \text{ keV}$  în interiorul stratului de substrat SiC.



**Figura 4.1** Profiluri de adâncime  $S(E_+)$  ale GaN/SiC. Erorile experimentale sunt de ordinul mărimii punctului experimental. Scările reprezintă cei mai buni parametri obținuți prin ajustarea unui model cu 4 straturi la datele experimentale cu ajutorul software-ului VEPFIT. Valorile reprezintă grosimea cumulată a straturilor. Partea superioară a figurii reprezintă datele experimentale și cea mai bună potrivire a fracției relative Ps,  $F_{Ps}(E_+)$

Deoarece Ps nu se formează în straturile GaN de volum, inegalitatea  $S_{\text{GaN1}} = 0.4576 \pm 0.0004 < S_{\text{GaN2}} = 0.4615 \pm 0.0004$  indică un număr mai mic (în dimensiune) de defecte, precum și un  $L_{\text{eff}}$  mai lung în substrat GaN1 [76]. Având în vedere dezacordul rezultat în  $L_{\text{eff}}^{\text{GaN1}} = 13 \pm 0.4 \text{ nm}$  fiind mai mic decât  $L_{\text{eff}}^{\text{GaN2}} = 75 \pm 20 \text{ nm}$ , motivul de bază ar putea fi legat de prezența unui câmp electric local îndreptat spre suprafață.

Rezultatele care rezumă caracteristicile straturilor de GaN, enumerate în acest studiu împreună cu rezultatele raportate anterior [72], [73] sunt prezentate în Tabelul 4.1. Comparând rezultatele, se poate observa că GaN prezintă o calitate cristalină îmbunătățită în proba GaN/SiC, cu cea mai mică densitate de defecte structurale  $\rho_d^t = 1.47 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ , cea mai mare valoare a  $L_{\text{eff}}^{\text{GaN2}} = 78 \pm 20 \text{ nm}$ , și cele mai înguste peakuri omega.

**Tabelul 4.1.** Densitatea totală a defectelor, lungimile de corelație a defectelor și lungimile efective de difuzie a pozitronilor în GaN, unde  $d$  este grosimea stratului,  $\rho_d^t$  este densitatea totală a dislocațiilor de tip șurub,  $r_d$  este distanța medie dintre două dislocații,  $L$  este lungimea de corelație a defectelor (marginie și de tip șurub) și  $L_{\text{eff}}$  este lungimea efectivă de difuzie a pozitronilor

Proba	$d_{\text{GaN}}$ [nm]	$\rho_d^t$ [cm <sup>-2</sup> ]	$r_d$ [nm]	$L$ [nm]			
				$L^e$	$L^s$	GaN1	GaN2
GaN/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> [72]	189	$7.49 \times 10^{10}$	36	155	229	$12.4 \pm 0.4$	$56 \pm 4$
GaN300/Si [73]	350	$4.37 \times 10^{11}$	15	27	107	$14.3 \pm 0.5$	$22 \pm 6$
GaN700/Si [73]	690	$2.35 \times 10^{11}$	21	41	220	$13.1 \pm 0.4$	$43 \pm 6$
GaN/SiC	567	$1.47 \times 10^{10}$	82	171	288	$13.0 \pm 0.4$	$78 \pm 20$

### 4.3 Rezumat

Relația heterostructurii substrat-buffer-film și consistența interfețelor sale, grosimea straturilor, densitatea dislocațiilor și lungimile de difuzie caracteristice pozitronilor în heterostructura GaN/AlN/SiC a fost evaluată folosind mai multe metode.

Această cercetare a fost completată cu contribuția lui V.L. Ene și B.S. Vasile (Universitatea Politehnica din București) pentru măsurătorile și analizele TEM, I. Zai și V. Leca pentru măsurătorile și analizele densităților de dislocații (ELI-NP) și D. Dinescu și N. Djourelou (ELI-NP) pentru investigarea cu pozitroni a filmelor de GaN. Pe baza acestor rezultate, au fost publicate trei articole, două în Nanomaterials (Basel) [73], [77] și unul în Materials (Basel) [72]. Această teză prezintă doar rezultatele din publicația semnată de A.B. Șerban *et.al.* "Studies of Defect Structure in

Epitaxial AlN/GaN Films Grown on (111) 3C- SiC" [77]. Acest articol reprezintă o analiză cuprinzătoare a rezultatelor experimentale obținute pe toate cele trei probe de GaN comercial.

Noi materiale pentru moderarea de pozitroni

## Capitolul 5

# Optimizarea și fabricarea dispozitivului de moderare a pozitronilor bazat pe o capcană magnetică

Pentru a produce pozitroni se folosesc acceleratoare, lasere cu impulsuri scurte ultra-intensive și reactoare nucleare. Spectrul energetic al pozitronilor emiși de la sursă variază din zona keV la câțiva MeV. Pentru a studia regiunile sub-suprafeței, filme subțiri sau structuri stratificate, lățimea de bandă energetică a pozitronilor trebuie redusă la câțiva eV. Cea mai bine cunoscută modalitate este un proces în două etape care implică moderarea pozitronilor. În prima etapă, pozitronii rapizi, energetici, trebuie convertiți într-un fascicul de pozitroni lenți și, apoi, în a doua etapă, trebuie accelerați până la o energie controlabilă. Folii monocristaline și plasele de tungsten sunt cei mai buni moderatori ai funcției de lucru [78], [79], iar gazele rare înghețate sunt moderatorii eficienți care utilizează lungimea de difuzie extinsă [80].

Conform rezultatelor obținute de Gerchow *și colab.* [18], capcana magnetică poate spori eficiența moderării pozitronilor unei folii de tungsten cu un factor de 20. Acest dispozitiv este alcătuit dintr-o cameră de vid și două bobine, care generează un câmp magnetic axisimetric de tip șa pentru a capta pozitronii rapizi emiși de la o folie  $^{48}\text{V}$ . Dispozitivul are un cost redus, este ușor de utilizat și poate fi folosit în configurația experimentală ELIPS. În plus, un ciclotron este disponibil la Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizică și Inginerie Nucleară "Horia Hulubei" (IFIN- HH) [81], iar echipa TR19 are deja expertiza necesară pentru a produce radioizotopul  $^{48}\text{V}$  [82]. Această metodă mărește cantitatea de pozitroni accesibili pentru procesul de moderare, ceea ce duce, în cele din urmă, la un nivel mai bun de eficiență.

## **5.1 Conceptul de dispozitiv bazat pe capcana magnetică.**

Confinarea pozitronilor într-o mașină cu oglinzi a fost descrisă pentru prima dată în 1960 de Gibson *și colab.* [83]. Simons a sugerat utilizarea unei capcane magnetice cu o folie subțire poziționată în centru ca degradator de energie în anii 1980 [84], [85]. Waeber *și colab.* [86] au încercat să folosească aceeași strategie pentru a reduce energia pozitronilor la câțiva keV înainte de a-i extrage și modera în afara capcanei magnetice pentru a crea un fascicul monoenergetic. Gerchow *și colab.* [18] au descris recent un dispozitiv de moderare a pozitronilor bazat pe o capcană magnetică, cunoscută și sub numele de mașină cu oglinzi magnetice, care captează majoritatea pozitronilor emiși de o folie de 1- $\mu\text{m}$ -grosime de  $^{48}\text{V}$  realizată dintr-o folie de Ti activată prin iradiere cu protoni de 12-MeV. Câmpul magnetic are o valoare maximă în centrul fiecărei bobine și un minim local între bobine, ceea ce duce la o confinare a particulelor încărcate. Particulele se deplasează de-a lungul unor traiectorii spiralate, aliniată cu axa capcanei, pe măsură ce trec între cele două bobine.

### **5.1.1 Capcană magnetică ideală**

Schema dispozitivului bazat pe capcana magnetică este prezentată în Figura 5.1. Acesta este format din două oglinzi magnetice. Raza maximă giromagnetică,  $r_g$ , a



Capitolul 5- Optimizarea și fabricarea dispozitivului de moderare a pozitronilor bazat pe o capcană magnetică

pozitronilor eliberați este multiplicată pentru a estima dimensiunea radială minimă a camerei de vid pentru o capcană magnetică ideală.

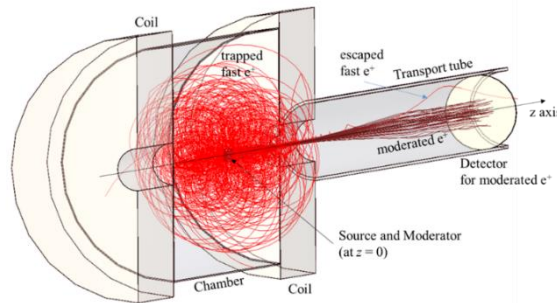
Cel mai mare  $r_g$  ar putea fi bine evaluat folosind masa pozitronului,  $m_e$ , energia punctului final al pozitronilor emiși,  $E_b$  ( $E_b = 694,68$  eV pentru  $^{48}\text{V}$ ), sarcina electronului,  $q$ , și  $B_z^{\text{ave}}(z = 0) = \int_{x=0}^{r_{\text{ch}}} B_z(z = 0, x) dx$  ( $r_{\text{ch}}$  reprezintă raza camerei), după cum urmează:

$$r_g = (2m_e E_b)^{0.5} / (q B_z^{\text{ave}}(z = 0)) \quad . \quad 5.1$$

Unghiul de pas,  $\Theta$ , este cel care determină conul de pierderi, iar ecuația care îl descrie este următoarea:

$$\Theta = (R_m - 1)^{-0.5} \quad 5.2$$

cu  $R_m = B^{\text{max}}/B^{\text{min}}$  fiind raportul de oglindire și  $B_z^{\text{max}}$  reprezentând maximum  $B_z(z, r = 0)$ , și  $B_z^{\text{min}}$  reprezentând minimumul local  $B_z(z = 0, r = 0)$ .



**Figura 5.1** Schema secțională a dispozitivului bazat pe o capcană magnetică, care prezintă o cameră cu două bobine ce funcționează ca oglinzi magnetice și un tub de transport [87]

Pentru a fi prinși în capcană, pozitronii trebuie să aibă un raport al vitezelor de  $v_z/v_r \leq \tan \Theta$ . O capcană ideală cu două bobine ar trebui să conțină bobine enorme cu raza  $\sim 2r_g$  care să furnizeze simultan un nivel ridicat de  $B_{\text{max}}$ , bobinele fiind distanțate astfel încât  $B_z(z = 0, r)$  să satisfacă ecuația 5.1. În consecință, construcția unei bobine magnetice puternice și, în același timp, uriașe este destul de costisitoare, iar tehnica de optimizare ar trebui să țină seama de elemente geometrice și bugetare specifice.

### 5.1.2 Limitări de proiectare. Sursă de pozitroni rapizi și moderator

Benda supraconductoare la temperatură înaltă este un conductor excelent pentru crearea unui câmp magnetic puternic, dar sunt scumpe și necesită multă expertiză și presupuneri pentru a o utiliza în dispozitiv. Un conductor comercial din cupru cu o secțiune transversală de  $12.5 \times 8.5 \text{ mm}^2$  ce au un canal gol cu diametrul de  $\varnothing 4,3 \text{ mm}$  și o sursă de alimentare de 10 kW se vor folosi pentru construirea bobinelor. Curentul maxim admisibil este limitat de rezistivitatea specifică a cuprului și de lungimea totală a conductorului. În Tabelul 5.1 sunt enumerați parametrii pentru configurațiile fezabile ale bobinelor.

**Tabelul 5.1** Se calculează raza exterioară, grosimea bobinei, înfășurările pe bobină, curentul maxim și lungimea totală a conductorului. Izolația suplimentară care înconjoară conductorii este inclusă (0,5 mm) în diametrul și grosimea bobinei. Curentul maxim al bobinei trebuie să fie mai mic decât curentul maxim al sursei de alimentare [87]

Configurație \ Parametru	L8w10	L9w9	L9w8	L10w7	L11w6	L12w5	L14w4	L16w3	L20w2
Straturi radiale	8	9	9	10	11	12	14	16	20
Înfășurări pe strat	10	9	8	7	6	5	4	3	2
Raza exterioară, $r_{co}$ (mm)	94.5	104.0	104.0	113.5	123.0	132.5	151.5	170.5	208.5
Grosimea bobinei (mm)	130.5	117.5	104.5	91.5	78.5	65.5	52.5	39.5	26.5
Curent maxim (A)	1000	917	1000	985	975	1000	958	1000	1000
Lungimea conductorului (m) pentru doua bobine	54.3	59.6	53.0	55.4	56.0	54.3	57.0	54.3	54.3

Pentru a preveni pierderea pozitronilor captați ca urmare a interacțiunii în interiorul volumului camerei, folia sursei de pozitroni, moderatorul și structura de susținere a plasei trebuie construite folosind cât mai puțin material posibil.

## 5.2 Procedura de simulare numerică

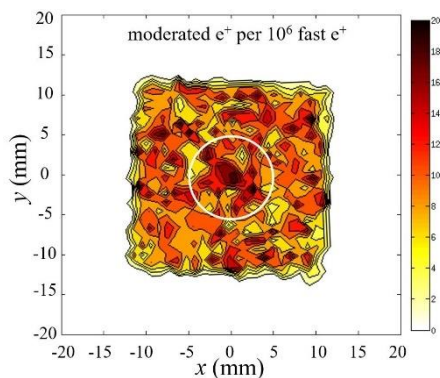
Dryzek și Horodek au prezentat dovezi că algoritmi GEANT4 produc modele de implantare care sunt în concordanță cu rezultatele experimentelor [88]. A fost dezvoltată o tehnică pentru a selecta pozitronii care vor fi moderați pe baza interacțiunii lor cu materialul moderator și apoi a obligat pozitronii să fie pompați în vid în starea lor moderată. Probabilitatea ca un pozitron termalizat să difuzeze spre suprafață se calculează folosind distanța  $d$  până la cea mai apropiată suprafață și lungimea de difuzie  $e^+$ , adică  $p = \exp(-d/L_+)$ . Atât moderatorul, cât și sursele de pozitroni rapizi pentru modul

de transmisie și, respectiv, de retroîmprăștiere, au fost stabilite în conformitate cu descrierile din referințele [18] și [89].

COMSOL [90] este utilizat pentru a calcula câmpurile magnetice și electrice prezente în dispozitivul bazat pe capcana magnetică, iar fișierele 3D ale geometriei dispozitivului sunt comparate cu cele din GEANT4 pentru a valida abordarea de simulare. Nu există informații furnizate de autori cu privire la dimensiunile geometrice ale sticlei magnetice. Câmpul magnetic cu valori de  $B_{\max} = 2559$  G și  $B_{\min} = 544$  G, și 66% din eficiența de moderare a pozitronilor oglindiți de la sursa de  $^{48}\text{V}$  a fost realizat folosind o configurație de două bobine cu o rază interioară de 78 mm, o rază exterioară de 200 mm, o grosime de 50 mm și fiecare furnizând o forță magnetomotoare de 53300 amperi-tur. Eficiența de extracție a fost de 94%. Un câmp electric între camera împământată și ansamblul moderator-sursă la un potențial mai mare de 600 V a garantat o rată de extracție de sută la sută. Modelul nostru a estimat  $\varepsilon_{\#1} = (0.24 \pm 0.02) \%$ . Faptul că valoarea raportului de ramificare  $Y_0 = 0,33$  a fost neglijată în modelul Gerchow și colab. [18] ar putea fi motivul pentru variația mare dintre cele două rezultate. Liniile de fascicule de pozitroni lenți cu ghidare magnetică utilizează o serie de bobine sau solenoizi lungi cu o densitate de flux magnetic axial,  $B_z^t$ , de aproximativ 100 G. După cum se vede în Figura 5.1, aranjamentul actual include un solenoid lung.

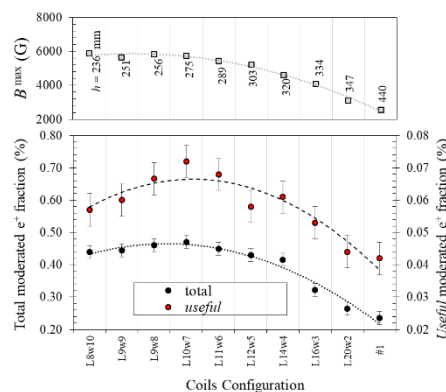
### 5.3 Rezultatele simulărilor numerice

Pozitronii moderați se deplasează în jos pe axa z cu o rază giromagnetică mică, iar  $B_z$  are o relație inversă cu profilul secțiunii transversale a fasciculului de pozitroni lenți rezultat. Un spot simulat de pozitroni moderați în interiorul solenoidului pentru ghidare magnetică  $B_z^t = 100$  G este prezentat în Figura 5.2. Obiectivul principal a fost de a examina configurația bobinei din configurația #1 (setup #1) în raport cu configurațiile bobinei care ar funcționa cu o sursă de putere de 10 kW.



**Figura 5.2** Spotul de pozitroni moderați pentru configurația bobinelor L10w7 sub ghidaj magnetic  $B_z^t = 100$  G în interiorul solenoidului de transport. Cercul alb marchează zona centrală de  $\varnothing 10$  mm [87]

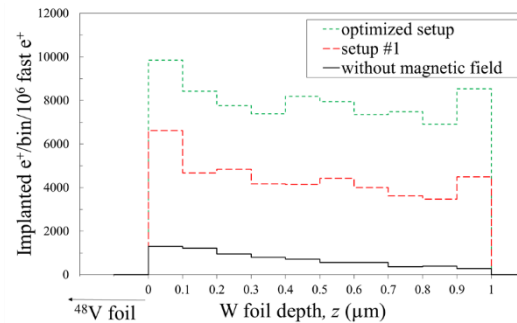
Simularea  $B_{min}$  este setată ca fiind egală cu 544 G, ca în configurația #1, prin ajustarea lungimii,  $h_{ch}$ , a camerei. Astfel încât o cantitate comparabilă de pozitroni să ajungă și să anihileze peretele cilindric al camerei în fiecare dintre configurațiile bobinelor enumerate. Pentru a ilustra acest lucru, Figura 5.3 afișează valoarea calculată (total și pozitroni moderați "utili") a lui  $B_{max}$ , precum și proporția de  $10^6$  pozitroni rapizi eliberați care sunt detectați ca pozitroni moderați în tubul de transport.



**Figura 5.3** Frația de pozitroni moderați totali și "utili" detectați împreună cu  $B_{max}$  în cazul configurației bobinelor prezentate în Tabelul 5.1 [87]

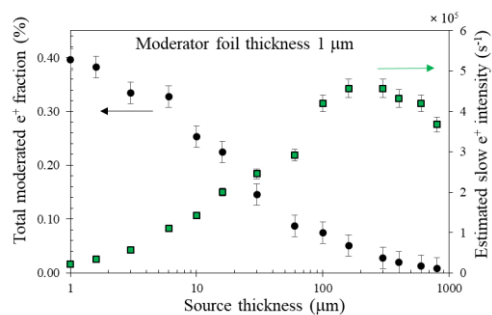
Lungimea camerei de  $h_{ch} = 300$  mm este un compromis rezonabil pentru obținerea unor procente totale și utile de pozitroni moderați aproape de valorile lor maxime. Camera cu  $r_{ch} = 100$  mm va fi aleasă cea mai potrivită pentru implementarea dispozitivului datorită costului mai mic pentru protecția scutului de plumb. Profilurile de adâncime ale pozitronilor simulați care sunt emiși din folia de  $^{48}\text{V}$  de  $1\mu\text{m}$  grosime și implantați în folia moderatoare W de  $1\mu\text{m}$  grosime înainte de a fi anihilați sunt prezentate în Figura 5.4. Acest studiu a comparat efectul configurației #1 și al

configurației optimizate asupra eficienței de moderare a pozitronilor opriți în stratul cuprins între 0.9-1  $\mu\text{m}$  al moderatorului. Rezultatele au arătat că configurația optimizată a avut o eficiență de moderare de aproape două ori mai mare decât configurația #1.



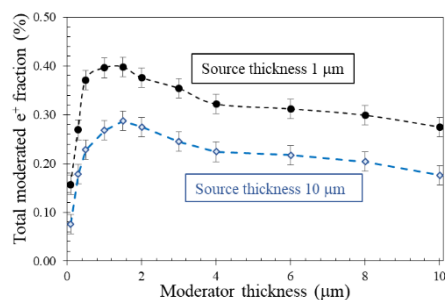
**Figura 5.4** Poziția simulată pe axa z a pozitronilor emiși de  $^{48}\text{V}$  cu grosimea de  $-1\mu\text{m}$  și implantați în  $-W$  [87]

Proporția totală de pozitroni moderați este calculată din datele activității sursei, iar din aceasta, intensitatea inițială lentă a pozitronilor pentru o folie activată timp de 8 ore, în funcție de grosime este estimată în Figura 5.5. Pentru a obține o sursă de  $^{48}\text{V}$  mai intensă, într-un timp prestabilit și în limita profilului secțiunii transversale a fasciculului de protoni, se va crește grosimea foliei de Ti.



**Figura 5.5** Frația totală moderată simulată de  $e^+$  și intensitatea inițială estimată de  $e^+$  pentru o activare de 8 ore a foliei sursă în funcție de grosimea foliei sursă [87]

Rezultatele simulării fracției totale de pozitroni moderați în funcție de grosimea foliei de moderare pentru folii sursă cu grosimea de 1 și 10  $\mu\text{m}$  sunt prezentate în Figura 5.6. Rezultatele arată că, pentru o anumită grosime a moderatorului, valoarea dezirabilă este undeva între 1 ÷ 2  $\mu\text{m}$ .



**Figura 5.6** Frația totală e<sup>+</sup> moderată simulată în funcție de grosimea foliei de moderare în cazurile de grosime a foliei sursă de 1 și 10 μm. [87]

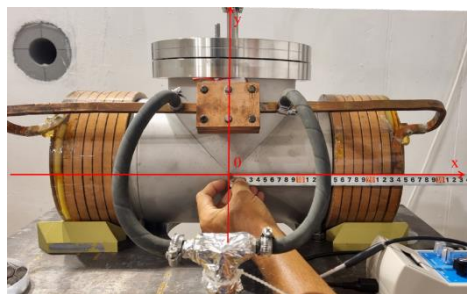
## 5.4 Fabricarea dispozitivului de moderare a pozitronilor

### 5.4.1 Construcția bobinelor

Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Inginerie Electrică - București (ICPE-CA) a fost implicat în mod special în fabricarea bobinelor. Pentru construcția bobinelor electromagnetice s-a stabilit să se folosească conductorul standard de cupru scobit în dimensiunile rezultate din cercetările de optimizare menționate anterior (a se vedea Tabelul 5.1.). A fost ales un conductor de cupru scobit de înaltă puritate (99,97%); acesta a fost izolat cu fibră de sticlă și rășină. S-a folosit vidul pentru a îngloba bobinele în rășină epoxidică (fără bule de aer).

## 5.5 Proiectarea și asamblarea instalației experimentale

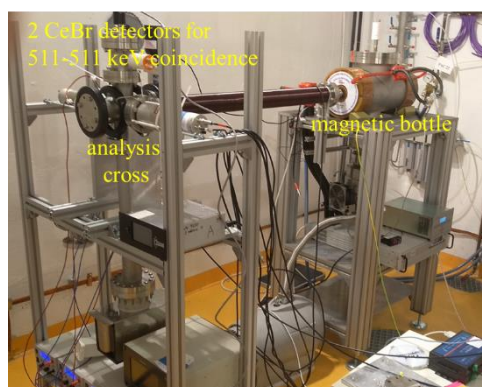
Pentru a putea realiza camera capcanei magnetice, a fost pregătit un proiect tridimensional, împreună cu desene care pot fi utilizate în producție. Pentru construcția tuturor flanșelor, tuburilor și pereților laterali s-a folosit oțel inoxidabil. În vederea pregătirii pentru aplicarea unui vid de  $10^{-7}$  mbar, camera a fost curățată, condiționată și supusă unui test de etanșeitate cu heliu. În plus, în sala experimentală a fost implementat un sistem de răcire cu apă special pentru bobine. Mai mult, magneții și cablurile au fost asamblate împreună cu camera de vid și au fost conectate la sistemul de răcire cu apă, după cum se poate observa în imaginea Figura 5.7.



**Figura 5.7** Camera de vid și magneții asamblați împreună. Axele de măsurare a câmpului magnetic

Pentru a determina nivelul de căldură generat de magneți, au fost efectuate teste ale circuitului de răcire cu apă. Magnetul atinge o temperatură de 57 °C atunci când este supus la cel mai mare curent care poate fi aplicat. Această temperatură limitează alimentarea cu energie electrică la un curent de mai puțin de 928 A, ceea ce duce la o putere aplicată de mai puțin de 9.7 kW. Structura de susținere în vid a fost concepută și construită în așa fel încât orice pierderi potențiale de pozitroni prinși în capcană care rezultă din contactul în interiorul volumului camerei să fie eliminate pe tot parcursul procesului de producție. Mai precis, suportul foliilor sursei de pozitroni, al foliei moderatorului și al plaselor a fost conceput astfel încât să utilizeze o cantitate minimă de material.

În cele din urmă, a fost asamblat montajul experimental, inclusiv tubul de transport al pozitronilor, crucea de analiză, detectoarele, pompele de vid și toate sursele de alimentare asociate. Ansamblul experimental este prezentat în Figura 5.8.



**Figura 5.8** Instalația experimentală capcană magnetică cu cruce de analiză echipată cu doi detectori de CeBr<sub>3</sub>.

### 5.5.1 Iradierea foliilor de Ti

Iradierea a 4 folii cu dimensiunea de  $10 \times 10 \text{ mm}^2$ , grosimea de  $2 \text{ }\mu\text{m}$  fiecare și puritatea de 99.6% a fost efectuată prin stivuirea lor în suportul de iradiere. Energia protonică extrasă a fost  $E_{\text{extr}} = 14 \text{ MeV}$ , iar energia fasciculului de protoni la ținta de titan a fost  $E_{\text{inc}} = 13.2 \text{ MeV}$ . Timpul de iradiere a fost de 1 h. Curentul de protoni a avut o valoare de  $I_p = 5 \text{ }\mu\text{A}$ . Curentul integral de  $5.0 \text{ }\mu\text{Ah}$  a produs o activitate a sursei de  $^{48}\text{V}$  de  $A_{\text{EoB}} = 245.5 \text{ kBq}$  pe folie și  $A_{\text{EoB}} (4 \text{ foils}) = 982 \text{ kBq}$  pentru 4 folii.

### 5.5.2 Recoacerea W

O temperatură de recoacere de aproximativ  $2600 \text{ }^\circ\text{C}$  este necesară, care este echivalentă cu  $0.7 T_M$  (temperatura de topire a W în Kelvin) [91] pentru a elimina orice imperfecțiuni care ar fi putut fi încă în materialul de tungsten. Acest lucru se datorează faptului că tungstenul are un punct de topire ridicat, care este  $3422 \text{ }^\circ\text{C}$ . În plus, este necesară o temperatură de recoacere de aproximativ  $1500 \text{ }^\circ\text{C}$  [92] pentru a curăța materialul de orice contaminare a suprafeței, cum ar fi oxizii. A fost dezvoltată și construită o cameră care va fi utilizată pentru recoacerea foliei de tungsten (moderator) prin utilizarea bombardamentului cu electroni. Recoacerea foliei de W, a fost realizată la un nivel de vid sub  $5 \times 10^{-6} \text{ mbar}$ . Temperatura măsurată cu ajutorul pirometrului a fost de  $\sim 2050 \text{ }^\circ\text{C}$  și a fost menținută în 2 cicluri complete în care fasciculul de electroni a acoperit întreaga folie.

## 5.6 Rezultate

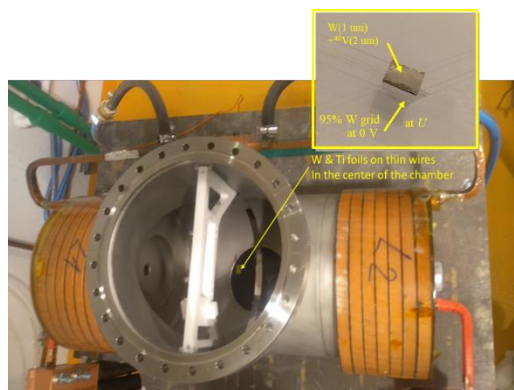
Primul pas pentru a înțelege la ce să ne așteptăm de la rezultatele experimentale a fost simularea proceselor fizice pentru configurația optimizată cu dimensiunile și condițiile reale. S-a demonstrat că toți pozitronii moderați și unii pozitroni rapizi scapă din capcana magnetică și sunt transportați prin tubul de transport către crucea de analiză.

Sistemul de achiziție de date este conceput pentru a măsura razele gamma de anihilare emise în direcții opuse de  $511 \text{ keV}$  prin detectarea de către doi detectori de  $\text{CeBr}_3$  având dimensiuni de  $3'' \times 3''$  și fiind plasați transversal față de axa fasciculului



de pozitroni în afara crucii de analiză. Experimentul a fost realizat cu plasa de W (grila) menținută la masă (potențial 0). Moderatorul de W și foliile de Ti iradiate au fost plasate pe ramă și introduse în camera de vid (a se vedea Figura 5.9). Experimentul s-a desfășurat la un potențial de +200 V (mod de *împingere*) și de -200 V (mod de *oprire*) aplicat pe foliile de W -<sup>48</sup>V. Potențialul de +200 V a fost utilizat ca mod de *împingere* pentru ca pozitronii moderați să fie împinși spre linia de transport. Tensiunea de -200 V a fost utilizată ca mod de *oprire* pentru a bloca pozitronii moderați.

O țintă de  $\varnothing 30$  mm a fost utilizată în crucea de analiză pentru măsurători și asupra ei a fost aplicat un potențial de -1000 V pentru a accelera pozitronii care ajung la țintă pentru a fi implantați și anihilați la o anumită adâncime. Razele gamma de anihilare cu energia de 511 keV emise în direcții opuse au fost detectate de către cei doi detectori de CeBr<sub>3</sub> de  $\varnothing 3'' \times 3''$  plasați transversal față de direcția fascicului de pozitroni. Electronica de achiziție a fost setată să lucreze în coincidență, ca în cazul măsurătorilor de calibrare, pentru a elimina razele gamma care pot apărea din anihilarea pozitronilor pe pereții camerei sau ai tubului de transport. Fiecare măsurătoare a durat cel puțin 1 h, iar eroarea estimată în determinarea ratei de numărare a coincidențelor a fost de 4,6% din valoarea măsurată.



**Figura 5.9** Camera capcanei magnetice asamblată împreună cu rama pe care sunt poziționate foliile și grila.

În plus, au fost măsurate cele două moduri de *împingere* și *oprire* a pozitronilor moderați. Diferența dintre ratele de numărare pentru modurile *împingere* și *oprire* reprezintă pozitronii moderați la țintă. Raportul dintre această valoare și rata de numărare obținută atunci când foliile de <sup>48</sup>V corespunzătoare au fost plasate în centrul crucii de analiză oferă eficiența moderării. În consecință, compararea datelor măsurate cu cele simulate în ceea ce privește valorile absolute ale pozitronilor rapizi și moderați la țintă și

Noi materiale pentru moderarea de pozitroni

compararea datelor măsurate și simulate privind eficiența moderării în funcție de grosimea totală a foliilor de  $^{48}\text{V}$  au demonstrat o concordanță foarte bună.

## 5.7 Rezumat

În acest capitol a fost descrisă optimizarea și fabricarea dispozitivului bazat pe o capcană magnetică. Interacțiunea dintre pozitroni și materie, inclusiv urmărirea pozitronilor, a fost realizată prin intermediul simulării în GEANT și COMSOL. Pentru construcția tuturor flanșelor, tuburilor și pereților laterali ai camerei s-a folosit oțel inoxidabil. Iradierea a 4 folii cu dimensiunea de  $10 \times 10 \text{ mm}^2$ , cu o grosime de  $2 \text{ }\mu\text{m}$  fiecare și de o puritate de 99,6% a fost realizată prin stivuirea lor în suportul de iradiere. A fost dezvoltată și construită o cameră care a fost utilizată pentru recoacerea foliei de tungsten (moderator) prin utilizarea bombardamentului cu electroni. Folia de W a fost recoaptă într-un nivel de vid sub  $5 \times 10^{-6} \text{ mbar}$  la o temperatură de  $\sim 2050 \text{ }^\circ\text{C}$  și a fost menținută în 2 cicluri complete în care fasciculul de electroni a acoperit întreaga folie.

Compararea datelor măsurate cu cele simulate privind valorile absolute ale pozitronilor rapizi și moderăți la țintă și eficiența moderării în funcție de grosimea totală a foliilor de  $^{48}\text{V}$  a demonstrat o concordanță foarte bună.

Această cercetare a fost o colaborare între trei grupuri: Laboratorul de Pozitroni, ELI-NP, Departamentul de Inginerie Electrică Neconvențională, ICPE-CA, și Departamentul de Fizică Nucleară Aplicată, IFIN-HH. Grupul de la ICPE- CA a fost responsabil pentru construirea bobinelor magnetice, iar grupul de la IFIN-HH pentru iradierea Ti. Pe baza studiului de optimizare, a fost publicat un articol în Nuclear Inst. and Methods in Physics Research Section A, [87].

# Capitolul 6

## Concluzii și perspective

În timpul etapei inițiale a acestei investigații, accentul principal a fost pus pe dezvoltarea unui nou moderator în mod de transmisie sau de reflexie, precum și a unui re-moderator FA. Acest prim capitol descrie studiul inițial care a fost realizat pentru a depune GaN și stratul tampon al acestuia, precum și caracterizarea filmelor care au fost produse ca o consecință pentru a dobândi un material de film subțire adecvat pentru moderarea pozitronilor. Un strat tampon a fost, de asemenea, luat în considerare ca o abordare potențială pentru a ajuta filmul de GaN să se relaxeze de la deformare și stres. Cu o țintă de Al oxidat, stratul tampon de AlN s-a dovedit a fi incapabil de a se realiza. Deși stratul tampon de ZnO s-a format pe toate probele, s-a descoperit contaminarea cu cupru și, ca urmare, depunerile au fost oprite odată ce ținta a fost deteriorată de un contact electric slab. Utilizând o țintă de Ti, faza TiN cu reflexia (200) a fost descoperită în probele depuse. S-a demonstrat că încercările făcute pentru a dezvolta filme epitaxiale nu au putut avea succes în circumstanțele descrise în acest capitol.

Pentru a demonstra că GaN este un moderator de pozitroni adecvat în faza epitaxială, cel de-al doilea capitol prezintă o cercetare originală care analizează calitatea cristalină a GaN disponibil în comerț, produs pe trei substraturi distincte. Lungimile de corelație a dislocațiilor observate  $L^e = 171$  nm și  $L^s = 288$  nm precum și distanța medie

Noi materiale pentru moderarea de pozitroni

dintre două dislocații ( $r_d = 82 \text{ nm}$ ) sunt mai mari decât cele constatate în heterostructurile examinate pe substraturile Si și  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Acest lucru demonstrează că utilizarea AlN-SiC ca strat tampon pentru GaN duce la obținerea unui cristal de calitate superioară. În plus, măsurătorile DBS au confirmat rezultatele menționate mai sus, cu o lungime efectivă de difuzie a pozitronilor mai mare  $L_{\text{eff}}^{\text{GaN}} = 75 \pm 20 \text{ nm}$  pentru stratul de GaN. S-a demonstrat că utilizarea acestui material ca moderator de pozitroni nu este adecvată, având în vedere configurația experimentală propusă.

Totodată, este prezentată o descriere a cercetării inițiale care a fost întreprinsă cu scopul de a îmbunătăți performanța unei capcane magnetice. Simulările au demonstrat că dispozitivul cu parametri ajustați ar avea o eficiență de moderare de două ori mai mare decât cea a dispozitivului Gerchow și colab. [18]. Interacțiunea dintre pozitroni și materie, inclusiv urmărirea pozitronilor, a fost realizată prin intermediul simulării GEANT și COMSOL. Pentru construcția tuturor flanșelor, tuburilor și pereților laterali ai camerei s-a folosit oțel inoxidabil. În vederea pregătirii pentru aplicarea unui vid de  $10^{-7}$  mbar, camera a fost curățată, condiționată și supusă unui test de etanșitate cu heliu. Iradierea a 4 folii cu dimensiunea de  $10 \times 10 \text{ mm}^2$ , și o grosime de  $2 \text{ }\mu\text{m}$  fiecare și o puritatea de 99,6% a fost efectuată prin stivuirea lor în suportul de iradiere.

A fost dezvoltată și construită o cameră care a fost utilizată pentru recoacerea foliei de tungsten prin utilizarea bombardamentului cu electroni. Folia de W a fost recoaptă într-un nivel de vid sub  $5 \times 10^{-6}$  mbar la o temperatură de  $\sim 2050 \text{ }^\circ\text{C}$  și a fost menținută în 2 cicluri complete în care fasciculul de electroni a acoperit întreaga folie.

S-a demonstrat că rezultatele simulate și cele experimentale sunt coerente, ceea ce duce la implementarea capcanei magnetice îmbunătățite.

# Bibliografie

- [1] C. D. Beling, S. Fung, L. Ming, M. Gong, and B. K. Panda, “Theoretical search for possible high efficiency semiconductor based field assisted positron moderators,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 149, no. 1, pp. 253–259, Aug. 1999, doi: 10.1016/S0169-4332(99)00211-1.
- [2] P. Coleman, *Positron Beams and Their Applications*. WORLD SCIENTIFIC, 2000. doi: 10.1142/3719.
- [3] M. Charlton *et al.*, “Positron production using a 9 MeV electron linac for the GBAR experiment,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, vol. 985, p. 164657, Jan. 2021, doi: 10.1016/j.nima.2020.164657.
- [4] C. Hugenschmidt, G. Kögel, R. Repper, K. Schreckenbach, P. Sperr, and W. Triftshäuser, “First platinum moderated positron beam based on neutron capture,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 198, no. 3–4, pp. 220–229, Dec. 2002, doi: 10.1016/S0168-583X(02)01527-6.
- [5] J. Störmer, A. Goodyear, W. Anwand, G. Brauer, P. G. Coleman, and W. Triftshäuser, “Silicon carbide: A new positron moderator,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 8, no. 7, p. 89, 1996, doi: 10.1088/0953-8984/8/7/002.
- [6] L. V. Jørgensen and H. Schut, “GaN—a new material for positron moderation,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 255, no. 1, pp. 231–233, 2008, doi: 10.1016/j.apsusc.2008.05.200.
- [7] N. Djourelov, A. Oprisa, D. Dinescu, and V. Leca, “Status of the project for a positron laboratory at ELI-NP,” in *Journal of Physics: Conference Series*, Jan. 2017, vol. 791, no. 1, p. 012011. doi: 10.1088/1742-6596/791/1/012011.
- [8] R. Zaleski, “Principles of positron porosimetry,” *Nukleonika*, vol. 60, no. 4, pp. 795–800, 2015, doi: 10.1515/NUKA-2015-0143.
- [9] P. Asoka-Kumar, M. Alatalo, V. J. Ghosh, A. C. Kruseman, B. Nielsen, and K. G. Lynn, “Increased Elemental Specificity of Positron Annihilation Spectra,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, no. 10, p. 2097, Sep. 1996, doi: 10.1103/PhysRevLett.77.2097.
- [10] F. Tuomisto, “Defect identification in semiconductors with positron annihilation: Experiment and theory,” vol. 85, no. December, 2013, doi: 10.1103/RevModPhys.85.1583.

- [11] J. Čížek, “Characterization of lattice defects in metallic materials by positron annihilation spectroscopy: A review,” *J. Mater. Sci. Technol.*, vol. 34, no. 4, pp. 577–598, Apr. 2018, doi: 10.1016/j.jmst.2017.11.050.
- [12] H. Stoll, M. Koch, K. Maier, and J. Major, “Positron age-momentum correlation studies of defects and positronium by an MeV positron beam,” *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, vol. 56–57, no. PART 1, pp. 582–585, May 1991, doi: 10.1016/0168-583X(91)96101-P.
- [13] N. G. Fazleev, M. P. Nadesalingam, W. Maddox, S. Mukherjee, K. Rajeshwar, and A. H. Weiss, “Oxidation and thermal reduction of the Cu(1 0 0) surface as studied using positron annihilation induced Auger electron spectroscopy (PAES),” *Surf. Sci.*, vol. 604, no. 1, pp. 32–37, Jan. 2010, doi: 10.1016/j.susc.2009.10.016.
- [14] S. Legl and C. Hugenschmidt, “A novel time-of-flight spectrometer for PAES,” *Phys. status solidi c*, vol. 4, no. 10, pp. 3981–3984, Sep. 2007, doi: 10.1002/PSSC.200675802.
- [15] N. Djourelou *et al.*, “POSITRON PRODUCTION BY GAMMA BEAM AT ELI-NP,” *Rom. Reports Phys.*, vol. 68, 2016.
- [16] G. Li, W. Wang, and W. Yang, “Reports on Progress in Physics Prospects of III-nitride optoelectronics grown on Si Related content GaN-based light-emitting diodes on various substrates: a critical review,” *Rep. Prog. Phys*, vol. 76, p. 106501, 2013, doi: 10.1088/0034-4885/76/10/106501.
- [17] D. Zhuang and J. H. Edgar, “Wet etching of GaN, AlN, and SiC: A review,” *Materials Science and Engineering R: Reports*, vol. 48, no. 1. Elsevier Ltd, pp. 1–46, Jan. 17, 2005. doi: 10.1016/j.mser.2004.11.002.
- [18] L. Gerchow *et al.*, “High Efficiency Cyclotron Trap Assisted Positron Moderator,” *Instruments 2018, Vol. 2, Page 10*, vol. 2, no. 3, p. 10, Jun. 2018, doi: 10.3390/INSTRUMENTS2030010.
- [19] “Nuclear Data.” <http://nucleardata.nuclear.lu.se/> (accessed Jul. 22, 2021).
- [20] C. Hugenschmidt, “Positrons in surface physics,” *Surface Science Reports*, vol. 71, no. 4. Elsevier, pp. 547–594, 2016. doi: 10.1016/j.surfrep.2016.09.002.
- [21] C. Hugenschmidt *et al.*, “The Upgrade of the Neutron Induced Positron Source NEPOMUC,” *J. Phys. Conf. Ser.*, vol. 443, no. 1, p. 012079, Jun. 2013, doi: 10.1088/1742-6596/443/1/012079.
- [22] C. Hugenschmidt *et al.*, “Unprecedented intensity of a low-energy positron beam,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, vol. 593, no. 3, pp. 616–618, Aug. 2008, doi: 10.1016/J.NIMA.2008.05.038.
- [23] C. Hugenschmidt *et al.*, “Positron experiments at the new positron beam facility NEPOMUC at FRM II,” *Phys. status solidi c*, vol. 4, no. 10, pp. 3947–3952, Sep. 2007, doi: 10.1002/PSSC.200675757.
- [24] H. Schut, A. van Veen, C. V. Falub, J. de Roode, and F. Labohm, “Performance of an Intense Nuclear-Reactor Based Positron Beam,” *Mater. Sci. Forum*, vol. 363–365, pp. 430–432, 2001, doi: 10.4028/WWW.SCIENTIFIC.NET/MSF.363-365.430.
- [25] R. H. Howell, R. A. Alvarez, and M. Stanek, “Production of slow positrons with a 100-MeV electron linac,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 40, no. 8, pp. 751–752, Aug. 1982, doi: 10.1063/1.93215.
- [26] C. Piochacz, “Generation of a High-brightness Pulsed Positron Beam for the Munich Scanning Positron Microscope,” 2009.

- [27] N. Djourelov, A. Oprisa, and V. Leca, “Source of slow polarized positrons using the brilliant gamma beam at ELI-NP. Converter design and simulations,” 2015, doi: 10.1016/j.nima.2015.10.009.
- [28] N. Djourelov, D. Dinescu, and V. Leca, “An overview of the design of ELIPS—A new slow positron beam line,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, vol. 934, pp. 19–25, Aug. 2019, doi: 10.1016/J.NIMA.2019.04.032.
- [29] K. F. Canter, P. G. Coleman, T. C. Griffith, and G. R. Heyland, “Measurement of total cross sections for low energy positron-helium collisions. (Positron backscattering from metal surface),” *J. Phys. B At. Mol. Phys.*, vol. 5, no. 8, p. L167, Aug. 1972, doi: 10.1088/0022-3700/5/8/007.
- [30] A. P. M. Jr., “Efficient generation of low-energy positrons,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 35, no. 5, p. 427, Aug. 2008, doi: 10.1063/1.91128.
- [31] P. G. Coleman, T. C. Griffith, and G. R. Heyland, “A time of flight method of investigating the emission of low energy positrons from metal surfaces,” *Proc. R. Soc. London. A. Math. Phys. Sci.*, vol. 331, no. 1587, pp. 561–569, Jan. 1973, doi: 10.1098/RSPA.1973.0008.
- [32] C. D. Beling, R. I. Simpson, M. Charlton, F. M. Jacobsen, T. C. Griffith, and P. Moriarty, “A Field-Assisted Moderator for Low-Energy Positron Beams,” vol. 116, pp. 111–116, 1987.
- [33] C. D. Beling *et al.*, “A field-assisted moderator for low-energy positron beams,” *Appl. Phys. A 1987 422*, vol. 42, no. 2, pp. 111–116, Jan. 1987, doi: 10.1007/BF00616719.
- [34] C. D. Beling, S. Fung, L. Ming, M. Gong, and B. K. Panda, “Theoretical search for possible high efficiency semiconductor based field assisted positron moderators,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 149, no. 1, pp. 253–259, 1999, doi: 10.1016/S0169-4332(99)00211-1.
- [35] M. Shi, D. Gerola, W. B. Waeber, and U. Zimmermann, “Slow positron beam extraction from high magnetic fields,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 85, no. C, pp. 143–148, Jan. 1995, doi: 10.1016/0169-4332(94)00323-8.
- [36] D. Gerola, W. B. Waeber, and M. Shi, “High efficiency positron moderation a feasibility study of the slow beam confinement extraction,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, vol. 364, no. 1, pp. 33–43, Sep. 1995, doi: 10.1016/0168-9002(95)00392-4.
- [37] D. Gerola, W. B. Waeber, and M. Shi, “Design and simulation of the PSI electrostatic positron beam,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 85, no. C, pp. 106–110, Jan. 1995, doi: 10.1016/0169-4332(94)00317-3.
- [38] J. Bardeen and W. H. Brattain, “The transistor, a semi-conductor triode [14],” *Physical Review*, vol. 74, no. 2. American Physical Society, pp. 230–231, Jul. 15, 1948. doi: 10.1103/PhysRev.74.230.
- [39] P. P. Paskov and B. Monemar, “Optical Properties of III-Nitride Semiconductors,” in *Handbook of GaN Semiconductor Materials and Devices*, CRC Press, 2017, pp. 87–116. doi: 10.1201/9781315152011-3.
- [40] B. Shen *et al.*, “III-nitride materials and characterization,” in *Handbook of GaN Semiconductor Materials and Devices*, CRC Press, 2017, pp. 3–52. doi: 10.1201/9781315152011.
- [41] K. K. Schuegraf and K. Seshan, “Handbook of Thin Film Deposition Processes and

- Techniques: Principles, Methods, Equipment and Applications,” *Angew. Chemie*, vol. 101, p. 646, 2002.
- [42] M. Ohring, *Materials Science of Thin Films: Deposition and Structure*. Academic Press, 2002.
- [43] S. Duan *et al.*, “A density functional theory approach to mushroom-like platinum clusters on palladium-shell over Au core nanoparticles for high electrocatalytic activity,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 13, no. 12, pp. 5441–5449, Mar. 2011, doi: 10.1039/C1CP20096H.
- [44] S. A. Kukushkin, A. V. Osipov, V. N. Bessolov, B. K. Medvedev, V. K. Nevolin, and K. A. Tcarik, “Substrates for epitaxy of Gallium Nitride: new materials and techniques,” *Rev. Adv. Mater. Sci.*, vol. 17, pp. 1–32, 2008.
- [45] D. D. McNamara, “How do eclogites deform in subduction and collision zones? An Alpine study,” 2009.
- [46] H. Föll and B. O. Kolbesen, “Agglomerate von Zwischengitteratomen (Swirl-Defekte) in Silizium - Ihre Bedeutung für Grundlagenforschung und Technologie,” in *Jahrbuch der Akademie der Wissenschaften in Göttingen*, 1976, p. 27. Accessed: Feb. 16, 2023. [Online]. Available: <http://dtrinkle.matse.illinois.edu/MatSE584/articles/swirl/swirl.html>
- [47] A. Stolz *et al.*, “Optical waveguide loss minimized into gallium nitride based structures grown by metal organic vapor phase epitaxy,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, no. 16, p. 161903, Apr. 2011, doi: 10.1063/1.3582055.
- [48] D. Doppalapudi, E. Iliopoulos, S. N. Basu, and T. D. Moustakas, “Epitaxial growth of gallium nitride thin films on A-Plane sapphire by molecular beam epitaxy,” *J. Appl. Phys.*, vol. 85, no. 7, p. 3582, Mar. 1999, doi: 10.1063/1.369718.
- [49] T. Maruyama and H. Miyake, “Gallium nitride thin films deposited by radio-frequency magnetron sputtering,” *J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film.*, vol. 24, no. 4, p. 1096, Jun. 2006, doi: 10.1116/1.2208988.
- [50] F. E. Chen, “PLASMA PHYSICS AND CONTROLLED FUSION SECOND EDITION Volume 1: Plasma Physics,” 1984.
- [51] F. Yam, L. Low, S. Oh, Z. H.-O.-M. And, and U. 2011, “Gallium nitride: an overview of structural defects,” in *Optoelectronics - Materials and Techniques*, 2011, pp. 99–136.
- [52] S. Keller, H. Li, and M. Laurent, “GaN-based light-emitting diodes on various substrates: a critical review,” *Reports Prog. Phys.*, p. 56501, doi: 10.1088/0034-4885/79/5/056501.
- [53] C. William, M. L. Huggins, R. N. York, M. F. Roy, L. B. Clapp, and C. W. Mason, “Theory of X-ray Diffraction in Crystals (Zachariasen, William H.),” *J. Chem. Educ.*, vol. 22, no. 7, p. 364, Jul. 1945, doi: 10.1021/ED022P364.1.
- [54] H. N. Southworth, “Scanning Electron Microscopy and Microanalysis,” in *Physicochemical Methods of Mineral Analysis*, 2012, pp. 421–450. doi: 10.1007/978-1-4684-2046-3\_11.
- [55] C. A. Schneider, W. S. Rasband, and K. W. Eliceiri, “NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis,” *Nature Methods*, vol. 9, no. 7. Nat Methods, pp. 671–675, Jul. 2012. doi: 10.1038/nmeth.2089.
- [56] D. C. Palmer, “CrystalMaker.” Begbroke, Oxfordshire, England, 2014.



- [57] S. Amelinckx, D. van Dyck, J. van Landuyt, and G. van Tendeloo, *Handbook of Microscopy: Applications in Materials Science, Solid-state Physics and Chemistry*. VCH, 2008. doi: 10.1002/9783527620524.
- [58] A. Bakhtazad and S. Chowdhury, “An evaluation of optical profilometry techniques for CMUT characterization,” *Microsyst. Technol.*, vol. 25, no. 9, pp. 3627–3642, Sep. 2019, doi: 10.1007/s00542-019-04377-4.
- [59] D. E. Eastman and M. I. Nathan, “Photoelectron spectroscopy,” *Phys. Today*, vol. 28, no. 4, pp. 44–51, 1975, doi: 10.1063/1.3068920.
- [60] C. Romanitan, I. Mihalache, O. Tutunaru, and C. Pachi, “Effect of the lattice mismatch on threading dislocations in heteroepitaxial GaN layers revealed by X-ray diffraction,” *J. Alloys Compd.*, vol. 858, p. 157723, Mar. 2021, doi: 10.1016/j.jallcom.2020.157723.
- [61] L. Liu and J. H. Edgar, “Substrates for gallium nitride epitaxy,” *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 37, no. 3, pp. 61–127, Apr. 30, 2002. doi: 10.1016/S0927-796X(02)00008-6.
- [62] A. B. Şerban, V. L. Ene, C. C. Gheorghiu, D. Balabanski, E. Andronescu, and V. Leca, “RF magnetron sputtering of gallium nitride (GaN) on sapphire substrate,” *UPB Sci. Bull. Ser. B Chem. Mater. Sci.*, vol. 81, no. 3, pp. 11–18, 2019.
- [63] M. E. Lin, B. Sverdlov, G. L. Zhou, and H. Morkoç, “A comparative study of GaN epilayers grown on sapphire and SiC substrates by plasma-assisted molecular-beam epitaxy,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 62, no. 26, pp. 3479–3481, Jun. 1993, doi: 10.1063/1.109026.
- [64] A. Uedono *et al.*, “Behaviors of vacancy-type defects in Mg-implanted GaN during ultra-high-pressure annealing studied by using a monoenergetic positron beam,” in *Gallium Nitride Materials and Devices XVI*, Mar. 2021, vol. 11686, p. 48. doi: 10.1117/12.2575972.
- [65] H. Wu, Y. Sun, D. Lin, R. Zhang, C. Zhang, and W. Pan, “GaN nanofibers based on electrospinning: Facile synthesis, controlled assembly, precise doping, and application as high performance UV photodetector,” *Adv. Mater.*, vol. 21, no. 2, pp. 227–231, 2009, doi: 10.1002/adma.200800529.
- [66] S. Hautakangas, I. Makkonen, V. Ranki, M. J. Puska, K. Saarinen, and D. C. Look, “Direct evidence of impurity decoration of Ga vacancies in GaN from positron annihilation spectroscopy,” pp. 1–4, 2006, doi: 10.1103/PhysRevB.73.193301.
- [67] H. Hu *et al.*, “Boosted ultraviolet electroluminescence of InGaN/AlGaN quantum structures grown on high-index contrast patterned sapphire with silica array,” *Nano Energy*, vol. 69, p. 104427, Mar. 2020, doi: 10.1016/j.nanoen.2019.104427.
- [68] Z. Liliental-Weber, T. Tomaszewicz, D. Zakharov, J. Jasinski, and M. O’Keefe, “Defects in p-GaN and their atomic structure,” in *IEEE Semiconducting and Semi-Insulating Materials Conference, SIMC*, 2005, vol. 2005, pp. 289–292. doi: 10.1109/SIM.2005.1511439.
- [69] S. Zhou, X. Liu, H. Yan, Z. Chen, Y. Liu, and S. Liu, “Highly efficient GaN-based high-power flip-chip light-emitting diodes,” *Opt. Express*, vol. 27, no. 12, p. A669, Jun. 2019, doi: 10.1364/oe.27.00a669.
- [70] Z. Liliental-Weber, T. Tomaszewicz, D. Zakharov, J. Jasinski, and M. A. O’Keefe, “Atomic structure of defects in GaN:Mg grown with Ga polarity,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, no. 20, Nov. 2004, doi: 10.1103/PhysRevLett.93.206102.

- [71] B. Li *et al.*, “Magnetic and structural properties of Fe-implanted GaN at room temperature,” *Vacuum*, vol. 184, p. 109909, Feb. 2021, doi: 10.1016/j.vacuum.2020.109909.
- [72] V. L. Ene *et al.*, “Study of Edge and Screw Dislocation Density in GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Heterostructure,” *Materials (Basel)*, vol. 12, no. 24, p. 4205, Dec. 2019, doi: 10.3390/ma12244205.
- [73] V. L. Ene *et al.*, “Defect structure determination of GaN films in GaN/AlN/Si heterostructures by HR-TEM, XRD, and slow positrons experiments,” *Nanomaterials*, vol. 10, no. 2, Feb. 2020, doi: 10.3390/nano10020197.
- [74] H. Lahrèche *et al.*, “Optimisation of AlN and GaN growth by metalorganic vapour-phase epitaxy (MOVPE) on Si(111),” *J. Cryst. Growth*, vol. 217, no. 1, pp. 13–25, Jul. 2000, doi: 10.1016/S0022-0248(00)00478-4.
- [75] C. Romanitan, R. Gavrilă, and M. Danila, “Comparative study of threading dislocations in GaN epitaxial layers by nondestructive methods,” *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 57, pp. 32–38, Jan. 2007, doi: 10.1016/j.mssp.2016.09.021.
- [76] Reinhard Krause-Rehberg and Hartmut S. Leipner, *Positron Annihilation in Semiconductors - Defect Studies*, 1st ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1999.
- [77] A. B. Serban *et al.*, “Studies of Defect Structure in Epitaxial AlN/GaN Films Grown on (111) 3C-SiC,” *Nanomater. 2021, Vol. 11, Page 1299*, vol. 11, no. 5, p. 1299, May 2021, doi: 10.3390/NANO11051299.
- [78] A. I. Williams *et al.*, “Moderation and diffusion of positrons in tungsten meshes and foils,” *J. Appl. Phys.*, vol. 118, p. 105302, 2015, doi: 10.1063/1.4930033.
- [79] O. G. De Lucio, M. Pérez, U. Mendoza, J. G. Morales, J. C. Cruz, and R. D. Dubois, “Study of tungsten based positron moderators,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 354, pp. 116–119, Jul. 2015, doi: 10.1016/j.nimb.2014.12.027.
- [80] G. Street, “Studies of positron moderation in surface charged rare gas solids,” vol. 76, pp. 305–308, 1993.
- [81] I. Ursu, L. Craciun, D. Niculae, and N. V. Zamfir, “The radiopharmaceuticals research center (CCR) of IFIN-HH at start,” *Rom. J. Phys.*, vol. 58, no. 9–10, pp. 1327–1336, 2013, Accessed: Oct. 15, 2022. [Online]. Available: [https://www.researchgate.net/publication/269930884\\_The\\_radiopharmaceuticals\\_research\\_center\\_CCR\\_of\\_IFIN-HH\\_at\\_start](https://www.researchgate.net/publication/269930884_The_radiopharmaceuticals_research_center_CCR_of_IFIN-HH_at_start)
- [82] F. Constantin, C. Barna, and P. Mereuta, “Positron annihilation spectroscopy studies of proton exchange membranes used in fuel cells,” *Polym. Adv. Technol.*, vol. 26, no. 12, pp. 1528–1530, Dec. 2015, doi: 10.1002/PAT.3575.
- [83] G. Gibson, W. C. Jordan, and E. J. Lauer, “Containment of positrons in a mirror machine,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 5, no. 4, pp. 141–144, Aug. 1960, doi: 10.1103/PhysRevLett.5.141.
- [84] J. Eades and L. M. Simons, “Deceleration in an anticyclotron as a means of producing very low energy antiprotons,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, vol. 278, no. 2, pp. 368–374, Jun. 1989, doi: 10.1016/0168-9002(89)90851-6.
- [85] L. M. Simons, “Recent Results on Antiprotonic Atoms using a Cyclotron Trap at LEAR,” *Phys. Scr.*, vol. 1988, no. T22, p. 90, Jan. 1988, doi: 10.1088/0031-

8949/1988/T22/013.

- [86] M. Shi, W. B. Waeber, D. Gerola, U. Zimmermann, and D. Taqqu, “Premoderation of positrons - Experiments on positron trapping and slowing-down,” *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. A*, vol. 349, no. 1, pp. 8–14, Sep. 1994, doi: 10.1016/0168-9002(94)90601-7.
- [87] N. Djourellov and A. B. Serban, “Optimization of a device for positron moderation based on a magnetic bottle,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, vol. 1014, p. 165699, Oct. 2021, doi: 10.1016/j.nima.2021.165699.
- [88] S. Agostinelli *et al.*, “GEANT4 - A simulation toolkit,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, vol. 506, no. 3, pp. 250–303, Jul. 2003, doi: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- [89] K. G. Lynn, B. Nielsen, and J. H. Quateman, “Development and use of a thin-film transmission positron moderator,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 47, pp. 239–240, 1985, doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.96231>.
- [90] *COMSOL Multiphysics®*, *COMSOL 4.3*, *COMSOL AB, Stockholm, Sweden, 2012*.
- [91] A. Debelle, M. F. Barthe, and T. Sauvage, “First temperature stage evolution of irradiation-induced defects in tungsten studied by positron annihilation spectroscopy,” *J. Nucl. Mater.*, vol. 376, no. 2, pp. 216–221, May 2008, doi: 10.1016/j.jnucmat.2008.03.002.
- [92] D. P. Verret and K. G. Ramanathan, “TOTAL HEMISPHERICAL EMISSIVITY OF TUNGSTEN.,” *J Opt Soc Am*, vol. 68, no. 9, pp. 1167–1172, Sep. 1978, doi: 10.1364/JOSA.68.001167.