# 1. Raport stiintific si tehnic

## **Cuprins**

2.1. Obiective generale2.2 Obiectivele fazei de execuție2.3 Rezumatul fazei2.4 Descrierea științifică și tehnicăConcluziiBibliografie

## 2.1 Obiective generale

- Obiectivul principal al proiectului constă în dezvoltarea expertizei și pregătirea de experimente pentru infrastructura ELI-NP,
- Studiul generării de radiație de particule accelerate cu laserul și a interacției acesteia cu semiconductori și cristale de fluorură cu aplicatii la celule solare, dispozitive electronice și detectori optici. Aceste teme sunt legate de temele 5.6.15 (Cercetare în domeniul științei materialelor în câmpuri cu radiație de intensitate mare) și 5.2.7 (Modelarea interacției laserilor de intensitate mare cu materia) din Cartea Albă a ELI-NP.

# 2.2 Obiectivele fazei de execuție

- O1: Proiectarea experimentelor de iradiere a cristalelor
  - A1.3 Pregatirea dispozitivului experimental: realizarea dispozitivului și punerea sa în funcțiune
  - A1.4 Iradierea probelor pregătite în dispozitivul experimental, pentru diferite intensitati ale laserului
- O2: Investigarea efectelor radiației asupra unor cristale de fluorură dopate cu pământuri rare

A2.3 Studiul defectelor structurale-dislocații în cristalele de  $(Ba/Ca)F_2$  dopate cu YbF<sub>3</sub> înainte și după iradiere

- O3: Investigarea efectelor radiației asupra unor cristale semiconductoare A3.1 Selectarea celulelor solare ce urmează a fi supuse interactiunii cu radiatia
- O4: Modelarea numerică a radiației de electroni și protoni accelerați prin interacțiunea laser cu o țintă subțire

A4.2 Testatrea eficientei programului de modelare PIC selectat pe supercomputerul IBM Blue Gene

A4.3 Validarea programului selectat prin compararea cu rezultate de accelerare laser a protonilor și electronilor raportate în literatură

#### 2.3 Rezumatul fazei (max 2 pagini)

In cadrul acestei faze au fost realizate urmatoarele activitati:

# A1.3 Pregatirea dispozitivului experimental: realizarea dispozitivului și punerea sa în funcțiune

Au fost realizate cele două dispozitive esentiale în derularea experimentelor de testare accelerată a degradării eficienței celulelor solare în condiții de iradiere similare cu cele din spațiu: (1) dispozitivul mecanic pentru poziționarea probelor (mostre cristaline și celule solare) în interiorul camerei de interacție CETAL și (2) standul experimental pentru testarea performanței celulelor solare înainte și după iradiere. Testele preliminare au arătat că iluminarea celulei cu un flux de radiație solară între 1300 W/m<sup>2</sup> și 1400 W/m<sup>2</sup>, conduce la o creștere a temperaturii celulei cu o valoare între 5 și 10 grade Celsius într-un interval de timp de 10 secunde. Ca urmare, la ridicarea caracteristicii I-V temperatura probei trebuie atent monitorizată. Noi am prevăzut o dublă monitorizare. Prima monitorizare este efectuată în timp real folosind un pirometru IR. Al doilea circuit de monitorizare a temperaturii este conectat la placa de achiziție de date și permite măsurarea temperaturii celulei exact în momentul măsurării curentului și tensiunii. Pentru comanda automată a achiziției de date a fost realizat un comutator electronic. La detectarea fluxului de lumină de către o fotodiodă are loc schimbarea stării comutatorului și transmiterea unui semnal către placa de achiziție de date. Achiziția datelor (I, V si T) are loc cu o intârzire de o secundă fată de momentul detectării semnalului de comandă. Această întârziere este necesară pentru depăsirea procesului tranzitoriu de la aprinderea lămpii, când fluxul luminos creste de la zero la valoarea constantei solare 1366.1W/m<sup>2</sup>.

### A2.3 Studiul defectelor structurale-dislocații în cristalele de (Ba/Ca)F<sub>2</sub> dopate cu YbF<sub>3</sub> înainte și după iradiere

Cristalele se caracterizează prin densitatea de dislocații, care se definește prin numărul de linii de dislocații care intersectează unitatea de suprafață și se măsoară în dislocații/cm<sup>2</sup>. Dislocațiile pot fi puse în evidență prin metoda corodării chimice. Pentru acest lucru cristalele de  $BaF_2$  și  $CaF_2$  se tratează cu soluție de acid clorhidric de diferite concentrații.

Cristalele au fost iradiate cu fascicol de electroni cu intensitatea de 0,5 MeV sau 1MeV. Pentru a observa efectul iradierii trebuie înregistrat spectrul de absorbție înainte și după iradiere. Deoarece spectrele de absorbție se efectuează pe probe șlefuite optic, aspectul fețelor atacate cu acid (respectiv fotografiile efectuate) pentru a pune în evidență dislocațiile după iradiere nu este așa de bun ca în cazul cristalelor proaspăt clivate și neșlefuite.

Evidențierea dislocațiilor (a gropilor de atac) în cazul cristalelor iradiate a fost mai dificilă, deorece suprafețele atacate chimic au fost șlefuite optic pentru măsurătorile necesare obținerii spectrelor de absorbție. Astfel, pe lângă creșterea de mai mult de 10 ori a numărului gropilor de atac se observă și urmele de șlefuire. În cazul cristalelor iradiate densitatea de dislocații crește de mai mult de 10 ori în comparație cu cele neiradiate.

## A3.1 Selectarea celulelor solare ce urmează a fi supuse interactiunii cu radiatia

Testarea degradării celulelor solare sub iradiere LPA (plasmă accelerată cu laserul) este o abordare nou propusă, care nu a mai fost realizată până acum. Astfel, am

decis să realizăm aceste experimente în două etape consecutive. Mai întâi, vor fi studiate efectele iradierii LPA asupra celulelor solare terestre neprotejate împotriva radiației cosmice. Acest pas reprezintă o oportunitate pentru a testa procedura de iradiere LPA asupra unor celule solare mult mau ieftine decât celulele solare spatiale (cu două ordine de mărime mai ieftine) și de a dobândi expertiză experimentală în a lucra cu această tehnică. Ulterior, experimentul va fi repetat folosind celule solare pentru aplicații spațiale, care sunt încapsulate într-un mini panou solar, pentru a reproduce cât mai fidel condițiile de operare a acestora în spațiul cosmic. Din considerente de cost, am selecționat pentru această testare cele mai mici panouri solare spațiale disponibile, care sunt utilizate în mod normal la construcția sateliților cubici de mică dimensiune (de exemplu, 0.5U CubeSat Solar Panel de la compania Clyde Space).

# A4.2 Testatrea eficientei programului de modelare PIC selectat pe supercomputerul IBM Blue Gene

Pentru a evalua eficiența codului PICLS pe supercomputerul BlueGene/P, aparatul care este actual în uz la Universitatea de Vest din Timișoara, s-a efectuat un studiu parametric folosind o ținta dreptunghiulară compusă din trei specii de particule (electroni, protoni și distribuiti uniform în reteaua ce compune tinta. Procesoarele deuteroni) supercomputerului BlueGene/P rulează la o frecventă de 0.85 GHz, având 4 GB memorie RAM disponibilă pe fiecare nucleu. Rezultatele arată o crestere liniară a timpului total de rulare cu creșterea numărului de macroparticule per procesor. Astfel, când s-au folosit doar 3 macroparticule per procesor timpul total a fost aproximativ 900 s, acest timp crescând la aproximativ 3200 s pentru 10 macroparticule per procesor. Această tendintă liniară este foarte folositoare la estimarea timpului de rulare a unei simulări pentru valori diferite a numărului de macroparticule pe fiecare procesor.

După realizarea acestui caz test, s-a efectuat o simulare mai realistă, a interacțiunii unui puls polarizat liniar cu o țintă gazoasă de O cu profil cos<sup>2</sup> folosind o rețea de 2000x2000 celule. În acest caz 20 de macroparticule au fost atribuite fiecărui procesor și simularea a rulat pentru 12001 pași de timp. Timpul total de rulare a fost aproximativ 432000 s (în jur de 5 zile).

# A4.3 Validarea programului selectat prin compararea cu rezultate de accelerare laser a protonilor și electronilor raportate în literatură

Pentru a valida acuratețea codului ales pentru procesul de accelerare laser-plasmă, un studiu parametric a fost creat pentru a estima energia protonilor accelerați de interacția unui puls laser cu o folie subțire supradensă. Lucrări anterioare din domeniu au demonstrat că țintele microstructurate și foliile curbate au un efect de colimare asupra fasciculului de particule accelerate, și astfel, aceste caracteristici au fost integrate în geometria țintei propuse pentru o evaluare comparativă. Comparând rezultatele obținute cu o țintă plană și cele obținute cu o țintă curbă, se poate observa colimarea fasciculului emergent în spatele foliei, în cazul unei ținte curbate, datorită curburii foliei. Asemănarea dintre rezultatele noastre și rezultatele raportate anterior în literatura de specialitate validează acuratețea codului PICLS în studierea problemelor propuse în acest proiect.

## 2.4 Descrierea științifică și tehnică

# A1.3 Pregatirea dispozitivului experimental: realizarea dispozitivului și punerea sa în funcțiune

Au fost realizate cele două dispozitive esențiale în derularea experimentelor de testare accelerată a degradării eficienței celulelor solare în condiții de iradiere similare cu cele din spațiu: (1) dispozitivul mecanic pentru poziționarea probelor (mostre cristaline și celule solare) în interiorul camerei de interacție CETAL și (2) standul experimental pentru testarea performanței celulelor solare înainte și după iradiere. Cele două dispozitive sunt descrise mai jos:

(1) Dispozitivul mecanic pentru poziționarea probelor în interiorul camerei de interacție CETAL a fost construit în conformitate cu documentația realizată în Activitatea 1.2 din planul de realizare a proiectului. Documentația a fost prezentată în detaliu în raportul la prima fază a proiectului. Dispozitivul a fost construit din duraluminiu. În figura 1 sunt prezentate două fotografii ale dispozitivului, o vedere din față și o vedere din spate. Poziționarea pe verticală este realizată manual iar poziționarea în planul orizontal este realizată automat, prin intermediul stagiilor de deplasare. Astfel, de fiecare dată înaintea derulării unui experiment, dispozitivul trebuie echipat cu stagiile de translație longitudinală (în lungul axei fascicolului) și transversală (deplasarea probelor perpendicular pe axa fascicolului). Stagiile disponibile la CETAL sunt de tip STANDA 8M173V. Dispozitivul a fost astfel conceput încât permite prinderea facilă a stagiilor prin însurubare.

Dispozitivul mecanic de poziționare a probelor a fost livrat la CETAL. Pe lângă experimentele propuse de noi, dispozitivol poate fi utilizat la implementarea multor alte experimente.



FIGURA 1. Dispozitivul mecanic pentru poziționarea probelor în interiorul camerei de interacție a infrastructurii CETAL: (a) vedere frontală; (b) vedere din spate.



FIGURA 2. Schema electrică de principiu a dispozitivului de măsurare a caracteristicii curent-tensiune a celulelor solare.

(2) Standul pentru testarea performanței celulelor solare include un simulator solar AMO și instrumentația pentru măsurarea caracteristicii curent-tensiune (I-V) a celulelor solare.

Instrumentația pentru măsurarea caracteristicii I-V este bazată pe o placă de achiziție NI USB-6210, fabricată de National Instruments. Schema electrică a dispozitivului de măsurarea a caracteristicii este prezentată în figura 2. În principiu, măsurarea caracteristicii I-V presupune măsurarea curentului și tensiunii la bornele celulei solare atunci când rezistența de sarcină variază între limitele zero (scurtcircuit) și infinit (circuit deschis). Circuitul nostru de măsură este prevăzut cu o rezistență de sarcină variabilă decadic între 0 si 10M $\Omega$ , cu rezolutie de 0.1 $\Omega$ . Tensiunea V este achizitionată direct în timp ce pentru măsurarea curentului a fost necesară realizarea unui convertor curent/tensiune. În circuitul din figura 2 simbolul ampermetru reprezintă un circuit de măsură format dintr-o rezistență de 0.22Ω realizată din manganină și un amplificator de instrumentație echipat cu circuitul integrat LT1168. Tensiunea culeasă de pe rezistentă (în domeniul 0...10 mV) este aplicată la intrarea amplificatorului de instrumentație. Amplificarea circuitului a fost setată la valoarea 100. Ca urmare, la intrarea plăcii de achiziție de date se aplică o tensiune în domeniul 0...1V, proporțională cu curentul furnizat de celulă. Circuitul de măsură este prezentat în figura 3a.

Testele preliminare au arătat că iluminarea celulei cu un flux de radiație solară între 1300  $W/m^2$  și 1400  $W/m^2$ , conduce la o creștere a temperaturii celulei cu o valoare

între 5 și 10 grade Celsius într-un interval de timp de 10 secunde. Ca urmare, la ridicarea caracteristicii I-V temperatura probei trebuie atent monitorizată. Noi am prevăzut o dublă monitorizare. Prima monitorizare este efectuată în timp real folosind un pirometru IR.



FIGURA 3. Schema de principiu (a) Ampermetru și (b) Termometru



FIGURA 4. Fotografie a dispozitivului experimental pentru măsurarea caracteristicii I V a unei celule solare (1) Placa de achiziție a datelor; (2) Termometru electronic; (3)
 Circuit de comandă; (4) Ampermetru; (5) Pyranometru

Astfel, startul măsurării unui punct de pe caracteristică va fi dat numai dacă temperatura inițială a celulei este egală cu valoarea prestabilită. Al doilea circuit de monitorizare a temperaturii este conectat la placa de achiziție de date șî permite măsurarea temperaturii celulei exact în momentul măsurării curentului și tensiunii. Temperatura este măsurată cu o sondă de tip PT100 peliculară lipită de celulă cu pastă siliconică și montată într-o punte Wheatstsone. Circuitul electric este prezentat în figura 3b.

Pentru comanda automată a achiziției de date a fost realizat un comutator electronic. La detectarea fluxului de lumină de către o fotodiodă are loc schimbarea stării comutatorului și transmiterea unui semnal către placa de achiziție de date. Achiziția datelor (I, V și T în figura 2) are loc cu o intârzire de o secundă față de momentul detectării semnalului de comndă.



FIGURA 5. Simulator cu fibră optică SolarLight Line A1

Această întârziere este necesară pentru depășirea procesului tranzitoriu de la aprinderea lămpii, când fluxul luminos crește de la zero la valoarea constantei solare 1366.1W/m<sup>2</sup>.

În figura 4 este prezentată o fotografie a circuitelor electrice realizate. De asemenea este vizibilă placa de achiziție a datelor și pyranometrul pentru măsurarea densității fluxului de lumină.

Toate aceste dispozitive au fost configurate în mod adecvat (atât din punct de vedere al hardware-ului cât și al software-uli) pentru măsurarea caracteristicilor I-V a celulelor solare.

Procedura de achiziționare a simulatorului solar AM0 (AM0 FLASH în figura 2) a fost finalizată. Am selecționat un simulator cu fibră optică SolarLight Line A1, fabricat de către Sciencetech Inc. USA (figura 5). Ghidul de fibră optică permite dirijarea fascilului luminos către probă (celula solară) montată pe dispozitivul experimental pentru măsurarea caracteristicii I-V. Simulatorul este echipat cu un flitru AM0 standard și generează un fascicul de clasă AAA (conform standardului ASTM) la intensitatea de 1366.1W/m<sup>2</sup>.

# A1.4 Iradierea probelor pregătite în dispozitivul experimental, pentru diferite intensitati ale laserului

Deoarece punerea in functiune a CETAL a fost intarziata, experimentele planificate s-au decalat pentru anul viitor.

In acest stadiu obiectivele proiectului nu sunt afectate si am luat urmatoarele masuri :

- 1. Suma prevazuta la Contracte cu terti a fost trecuta la personal pentru realizarea urmatoarelor activitati suplmentare:
  - a. Iradierea unor mostre de cristale de CaF2 cu un fascicul de electroni la Centrul de radioterapie din Timisoara si analiza structurii de defecte a acestora. Aceste rezultate ne furnizeaza informatii despre doza de iradiere care ar trebui folosita pentru obtinerea unor efecte semnificative asupra proprietatilor cristalelor si sunt incluse in activitatea 2.3.
  - b. Deoarece in timpul testelor am constat ca iluminarea celulei solare in conditii AM0 o perioada de timp mai mare de 2 secunde conduce la cresterea temperaturii acesteia si alterarea caracteristicii curent-tensiune a fost necesara masurarea caracteristicii curent-tensiune secvential si nu direct cum a fost prevazut in propunerea initiala. Astfel, in plus fata de sistemul de achizitie a datelor, prevazut in activitatea 1.3, a fost necesara realizarea unui circuit electronic pentru monitorizarea temperaturii si controlul comenzilor de achizitie a curentului si tensiuniiiul la debutul perioadei de stabilitate a fluxului luminos. Circuitul electronic suplimentar si functionarea acestuia sunt descrise in raportul tehnic in cadrul activitatii 1.3.

# A2.3 Studiul defectelor structurale-dislocații în cristalele de $(Ba/Ca)F_2$ dopate cu YbF<sub>3</sub> înainte și după iradiere

Formarea dislocațiilor pe suprafața care crește (interfața de cristalizare), indiferent de procesul ales, este determinată de tendința de micșorare a energiei elastice. Prin generarea dislocațiilor chiar în timpul procesului de creștere, cristalul nu se eliberează de tensiuni, ci crește dintr-o dată, într-o stare netensionată. Tensiunile de pe frontul de cristalizare sunt determinate de câmpul termic din cristal, care în general este destul de complex. În cel mai

simplu caz, în cristal există atât un flux de căldură radial, cât și unul axial. Fluxul termic radial, în majoritatea cazurilor, corespunde răcirii cristalului cilindric format, pe când cel axial este legat de însuși procesul de creștere.

Calitatea cristalelor este puternic influențată de câmpul termic în care are loc cristalizarea, motiv pentru care înainte de procesul propriu-zis de creștere se analizează distribuția câmpului termic în încălzitor.

Cristalele se caracterizează prin densitatea de dislocații, care se definește prin numărul de linii de dislocații care intersectează unitatea de suprafață și se măsoară în dislocații/cm<sup>2</sup>.

Dislocațiile pot fi puse în evidență prin mai multe metode, aici s-a folosit metoda corodării chimice.

Dacă suprafața liberă a unui cristal, tăiat după un anumit plan cristalografic, este supusă acțiunii unui reactiv chimic, anume ales, pe suprafață vor apărea niște adâncituri piramidale, având forme mai mult sau mai puțin regulate, pe care le vom numi "gropi de atac" (etch pits). Morfologia acestor urme este influențată de structura cristalografică a cristalului, de planul cristalografic corodat, de temperatura și compoziția reactivului chimic folosit.

BaF<sub>2</sub> și CaF<sub>2</sub> se tratează cu soluție de acid clorhidric de diferite concentrații.

Forma figurilor gropilor de atac este determinată de direcția liniei de dislocație în raport cu suprafața liberă. Dacă liniile de dislocații sunt paralele între ele și perpendiculare pe suprafață, forma gropilor este simetrică, figura geometrică obținută depinzând, în primul rând, de simetria cristalografică. Liniile de dislocații paralele, dar înclinate față de suprafață, conduc la gropi de atac asimetrice. Gropile de atac corespunzătoare dislocațiilor apar mai bine conturate în cazul planelor cristalografice de împachetare maximă, cum este planul de clivaj (111) pentru BaF<sub>2</sub> și CaF<sub>2</sub>. Dacă planele cristalografice atacate fac un unghi cu planele cristalografice cu indici mici, este posibil ca să nu se mai formeze gropi de atac corespunzătoare dislocațiilor sau forma lor geometrică să fie asimetrică. Forma gropilor de atac depinde de concentrația acidului folosit (vezi figura 1), efect studiat în cazul cristalelor de CaF<sub>2</sub>.



Fig. 1. Dislocații pe suprafața de clivaj [111] a cristalelor de  $CaF_2$  - punerea în evidență folosind HCl de diverse concentrații



Fio ? Dislocatie denlasată

Groapa de atac, corespunzătoare dislocației, se va adânci atâta timp cât dislocația este prezentă în acel loc. Dacă dislocația se deplasează, groapa de atac inițial formată nu se va mai adânci în continuare, în schimb va crește lateral și va forma un triunghi de piramidă, așa cum se vede în figura 2.

Studiul dislocatiilor in cristalele de CaF2 dopate cu YbF3



*Fig.3. Dislocații în cristalele CaF2:0,17mol%YbF3.* **Densitatea de dislocații**  $7,9*10^4$  (**dis/cm<sup>2</sup>**)



Fig. 4. Dislocații în cristalele  $CaF_2:0,7 \text{ mol}\%YbF_3$ . Densitatea de dislocații  $8,8*10^4$  (dis/cm<sup>2</sup>)



Variația densității de dislocații cu concentrația de YbF<sub>3</sub> în cristalele de CaF<sub>2</sub>.

Densitatea de dislocații ale cristalelor studiate este de ordinul a  $10^4$  dislocații/ cm<sup>2</sup>, valoare ce corespunde unor cristale de bună calitate.

Fig. 5. Studiul dislocatiilor in cristalele de BaF<sub>2</sub> dopate cu YbF<sub>3</sub>



	BaF <sub>2</sub> :	BaF <sub>2</sub> :	BaF <sub>2</sub> :	CaF₂	CaF <sub>2</sub> :	CaF <sub>2</sub> :
Crystal	0.05 mol% YbF₃	0.1 mol% YbF₃	0.2 mol% YbF₃		0.17 mol% YbF₃	0.7 mol% YbF₃
Etch pit shape				1	Z	F
10 <sup>4</sup> dis/cm <sup>2</sup>	6.1	11.3	2.4	5.5	7.3	8.8

Tabel 1. Forma gropilor de atac și densitatea de dislocații în cristalele dopate cu YbF<sub>3</sub>

Cristalele au fost iradiate cu fascicol de electroni cu intensitatea de 0,5 MeV sau 1MeV. Pentru a observa efectul iradierii trebuie înregistrat spectrul de absorbție înainte și după iradiere. Deoarece spectrele de absorbție se efectuează pe probe șlefuite optic, aspectul fețelor atacate cu acid (respectiv fotografiile efectuate) pentru a pune în evidență dislocațiile după iradiere nu este așa de bun ca în cazul cristalelor proaspăt clivate și neșlefuite.



Fig. 6. Variatia culorii cristalului în functie de metoda de iradiere

După iradiere spectrul de absorbție al cristalelor se schimbă față de cel al cristalului netratat, și anume apar o serie de benzi de absorbție, datorită formării centrilor de culoare. Dacă benzile de absorbție sunt în domeniul vizibil cristalele iradiate sunt colorate. Benzile de absorbție depind de tipul iradierii: RX, fascicul de electroni, etc. Culoarea observată este culoarea complementară ce corespund benzilor absorbție.

Este cunoscut faptul că centri de culoare care se formează depind de metoda folosită, cât și de condițiile în care au fost crescute cristalele [*Smakula 1927, 1949, Fowler 1968, De 1988*]. Aceasta înseamnă că spectrele de absorbție care caracterizează diferiți centri de culoare variază de la un cristal la altul, de la o metodă la alta (Fig.6).

Cristalele iradiate cu ioni având energia cuprinsă între 0.5 și 1MeV, prezintă un semnal RES la temperatura de 20K datorită formării centrilor F; la iradierea la temperatura camerei se formează și centri V,  $F^-$  și U<sup>-</sup>, precum și coloizi.

În figura 7 se arată spectrele de absorbție a două probe: cristal de  $CaF_2$  pur iradiat cu fascicul de electroni (1MeV) la temperatura camerei și un cristal ce conține ioni de  $Pb^{2+}$ . În cazul cristalelor  $CaF_2$  pure se observă apariția a două benzi de absorbție la 360 nm și 528 nm, iar în cazul cristalului dopat cu ioni  $Pb^{2+}$  apare o bandă în plus la 775 nm, care modifică puțin spre roșu culoarea cristalului iradiat.



Fig. 7. Spectre de absorbție:  $CaF_2$  pur iradiat cu un fascicul de electroni (1MeV) și  $CaF_2$ inpurificat cu ioni de  $Pb^{2+}$ . Se prezintă și fotografiile probelor iradiate.

În figura 8 se arată comparativ gropile de atac corespunzătoare dislocațiilor în cazul unui cristal  $CaF_2$  pur, inainte și după iradiere cu un fascicul de electroni (1MeV).



Fig.8. Gropi de atac (dislocații) în cristal pur de CaF<sub>2</sub> inainte și după iradiere.

Densitatea de dislocații în cristalele iradiate crește puțin de la 2.10<sup>4</sup> la 3,5 .10<sup>4</sup> dislcm<sup>2</sup>



*Fig.9.Forma geometrică a gropilor de atac (dislocații) în cristal pur de CaF<sub>2</sub> inainte și după iradiere.* Forma geometrică a dislocațiilor nu se modifică, dar pentru acelaș timp de atac mărimea dislocațiilor în cazul cristalelor iradiate este mai mare (Fig. 9).

În cazul cristalelor dopate YbF<sub>3</sub> în urma iradierii cu un fascicul de electroni de 0,5 MeV nu se formează benzi de absorbție în domeniul vizibil (Fig.10.). Ca urmare cristalele rămân incolore. Se observă creșterea coeficientului de absorbție în domeniul UV corespunzător ionilor de Yb<sup>2+</sup>, probabil datorită conversiei de valență a ionilor Yb<sup>3+</sup> (domeniul IR) în urma iradierii cu electroni.



*Fig.10.Spectrele de absorbție ale cristalelor dopatecu YbF<sub>3</sub> inainte și după iradiere.* 

Evidențierea dislocațiilor (a gropilor de atac) în cazul cristalelor iradiate a fost mai dificilă, deorece suprafețele atacate chimic au fost șlefuite optic pentru măsurătorile necesare

obținerii spectrelor de absorbție. Așa cum se vede în figura 11. pe lângă creșterea de mai mult de 10 ori a numărului gropilor de atac se observă și urmele de șlefuire. În cazul cristalelor iradiate densitatea de dislocații crește de mai mult de 10 ori în comparație cu cele neiradiate.



*Fig.11.Distribuția gropilor de atac în cazul cristalelor dopate cu YbF*<sup>3</sup> *înainte și după iradiere.* 

# Bibliografie

- A. De, K.V. Rao, Phys. Stat. Sol. A., 106 (1988) 297.
- D. Messner, A. Smakula, Phys. Rev 120 (1960)1162
- A.Smakula, Z.Physik 45 (1927) 1.
- A. Smakula, Phys. Rev., 77 (1949) 408

#### A3.1 Selectarea celulelor solare ce urmează a fi supuse interactiunii cu radiatia

Testarea degradării celulelor solare sub iradiere LPA (plasmă accelerată cu laserul) este o abordare nou propusă, care nu a mai fost realizată până acum. Astfel, am decis să realizăm aceste experimente în două etape consecutive. Mai întâi, vor fi studiate efectele iradierii LPA asupra celulelor solare terestre neprotejate împotriva radiației cosmice. Acest pas reprezintă o oportunitate pentru a testa procedura de iradiere LPA asupra unor celule solare mult mau ieftine decât celulele solare spatiale (cu două ordine de mărime mai ieftine) și de a dobândi expertiză experimentală în a lucra cu această tehică. Ulterior, experimentul va fi repetat folosind celule solare pentru aplicații spațiale, care sunt încapsulate într-un mini panou solar, pentru a reproduce cât mai fidel condițiile de operare a acestora în spațiul cosmic. Din considerente de cost, am selecționat pentru această testare cele mai mici panouri solare spațiale disponibile, care sunt utilizate în mod normal la construcția sateliților cubici de mică dimensiune (de exemplu, 0.5U CubeSat Solar Panel de la compania Clyde Space).

Pentru prima etapă au fost testate mai multe tipuri de celule solare cristaline. Criteriul de selecție a fost reprezentat de factorul de formă. Au fost selectate două celule din siliciu din care au fost tăiate plachete de 2cm x 1cm. Intrucât grosimea plachetelor este de 200 microni pentru tăiere acestea au fost fixate cu parafină între două plăci de sticlă, tăierea realizându-se cu disc diamantat la turație mică. Decuparea unei probe a durat aproximativ 8 ore.

Considerăm că sarcinile din această etapă au fost îndeplinite, având realizate dispozițivul de poziționare a probelor în camera de interactie CETAL, standul de măsurare a caracteristicii sub spectrul AM0 și probele decupate din celulele solare. Astfel au fost îndeplinite toate cerințele pentru implementarea în etapa a treia a proiectului a activității 3.2 – Testarea eficienței celulelor solare înainte și după iradierea în camera de interacțiune CETAL.

# A4.2 Testatrea eficientei programului de modelare PIC selectat pe supercomputerul IBM Blue Gene

Pentru a evalua eficiența codului PICLS pe un supercomputer precum supercomputerul BlueGene/P, aparatul care este actual în uz la Universitatea de Vest din Timișoara, am efectuat un studiu parametric folosind o ținta dreptunghiulară compusă din trei specii de particule (electroni, protoni și deuteroni) distribuiți uniform în rețeaua ce compune ținta. Procesoarele supercomputerului BlueGene/P rulează la o frecvență de 0.85 GHz, având 4 GB memorie RAM disponibilă pe fiecare nucleu.

Deoarece descompunerea domeniului în codul PICLS este realizată doar pe axa Oy, un fișier cu parametrii necesari a fost creat, în care numărul de macroparticule atribuit fiecărui procesor pentru aceeași valoare Ox a fost variat de la 2 la 10 macroparticule, menținând constant numărul de procesoare.

Caracteristicile pulsului laser utilizat pentru simulări sunt: polarizare liniară, profil Gaussian, lungime de undă de 1  $\mu$ m și o intensitate de I = 1.3  $\cdot 10^{19}$  W/<sub>cm<sup>2</sup></sub>. Pulsul laser se propagă de la stânga la dreapta în domeniul de calcul și are dimensiunea focală de 10 µm și se focalizează după ce parcurge o distanță de 24 de microni prin vid.  $n_{e} = 40n_{c}$ Densitatea tintei fost considerată a cu 0 densitate critică $n_c = 1.71 \cdot 10^{21} cm^{-3}$ . Mărimea sistemului considerat este de 3000x2000 unități de lungime Debye peste care s-a generat o rețea de 300x200 celule, cu un pas de rețea dx = 10 unități de lungime Debye. Pasul temporal este dt = 1 unități de frecvență a plasmei. Fiecare simulare din cadrul studiului de scalabilitate a efectuat 4001 pași de timp.

Rezultatele obținute sunt prezentate în figura următoare.



Scalability on 0.85 GHz processors

Figura 1. Timp total de rulare în funcție de numărul de macroparticule per procesor folosind supercomputerul BlueGene/P

Figura 1 arată o creștere liniară a timpului total de rulare cu creșterea numărului de macroparticule per procesor. Astfel, când s-au folosit doar 3 macroparticule per procesor timpul total a fost aproximativ 900 s, acest timp crescând la aproximativ 3200 s pentru 10 macroparticule per procesor. Această tendință liniară este foarte folositoare la estimarea timpului de rulare a unei simulări pentru valori diferite a numărului de macroparticule pe fiecare procesor.

După realizarea acestui caz test, am efectuat o simulare mai realistă, a interacțiunii unui puls polarizat liniar cu o țintă gazoasă de O cu profil cos<sup>2</sup> folosind o rețea de 2000x2000 celule. În acest caz 20 de macroparticule au fost atribuite fiecărui procesor și simularea a rulat pentru 12001 pași de timp. Timpul total de rulare a fost aproximativ 432000 s (în jur de 5 zile).

# A4.3 Validarea programului selectat prin compararea cu rezultate de accelerare laser a protonilor și electronilor raportate în literatură

Pentru a valida acuratețea codului ales pentru procesul de accelerare laser-plasmă, un studiu parametric a fost creat pentru a estima energia protonilor accelerați de interacția unui puls laser cu o folie subțire supradensă. Lucrări anterioare din domeniu au demonstrat că o țintele microstructurate [1] și foliile curbate [2] au un efect de colimare asupra fasciculului de particule accelerate, și astfel, aceste caracteristici au fost integrate în geometria țintei propuse pentru o evaluare comparativă.

Caracteristicile pulsului laser utilizat pentru simulări sunt: polarizare circulară, lungime de undă de 800 nm și o intensitate de I =  $1 \cdot 10^{22} \text{ W}/_{\text{cm}^2}$ . Pulsul laser se propagă de la stânga la dreapta în domeniul de calcul și are dimensiunea focală de 10 µm și se focalizează după ce parcurge o distanță de 10 microni prin vid. Densitatea țintei a fost considerată  $n_e = 300n_c$  cu  $n_c = 1.71 \cdot 10^{21} cm^{-3}$ . Mărimea sistemului considerat este de 3394.5x3394.5 unități de lungime Debye peste care o rețea de 2190x2190 celule a fost generată, cu un pas de rețea dx = 1.55 unități de lungime Debye. Pasul temporal este dt = 1.55 unități de frecvență a plasmei. Fiecare simulare din cadrul studiului a efectuat 8001 pași de timp.

Geometria țintei folosită in simulări este compusă dintr-o folie subțire convexă populată cu carbon și electroni la care este atașată, în partea din spate, o microstructură bogată în protoni. Grosimea foliei a fost variată de la 320 nm la 420 nm cu un increment de 16 nm, menținând constantă dimensiunea microstructurii, proporțională cu dimensiunea focală a pulsului laser. Geometria țintei este descrisă în figura 2.



Figura 2. Geometria țintei

Profilele distribuțiilor de energie ale protonilor și ale ionilor de carbon rezultate din studiul efectuat sunt prezentate în figura 3.





Din graficele anterioare este clară accelerarea unui număr considerabil de particule la energii joase, cu maxime la 64 MeV pentru protoni, respectiv 580 MeV pentru ionii de carbon. Simulările dezvăluie un număr semi-constant de particule cu energii medii, cu puține particule accelerate la energii maxime și o majoritate de particule accelerate la energii joase. Un trend similar a fost observat și în literatura de specialitate [3,4,5].



Figura 4. Energia maximă a particulelor ca funcție de grosimea țintei

Se poate observa din figura 4.a) tendința descendentă urmată de energia maximă a protonilor în zona 320-420 nm a grosimii țintei și o creștere a acesteia pentru grosimi între 440-480 nm. Pe de altă parte, profilul energiei maxime a ionilor de carbon scade odată cu creșterea grosimii țintei. Lucrări anterioare din domeniu în care s-a studiat energia particulelor pentru diferite grosimi ale țintei au raportat tendințe similare pentru energiile maxime obținute [6,7,8].

O comparație a distribuției densității de sarcină între accelerarea realizată pe o țintă dreaptă și o țintă curbată este prezentată în figura 5.





b) țintă curbată - 320 nm

Figura 5. Colimarea fasciculului - comparație

Comparând rezultatele obținute cu o țintă plană și cele obținute cu o țintă curbă, se poate observa colimarea fasciculului emergent în spatele foliei, în cazul unei ținte curbate, datorită curburii foliei. Colimarea începe la 15 lungimi de undă de laser după țintă, pe când pentru o țintă plană particulele emergente sunt dispersate, fără a se realiza o colimare definită.

Poziția punctului de colimare în funcție de grosimea țintei și creșterea razei de curbura este descrisă în figura 6.



a) grosime țintă - 336 nm

b) grosime țintă - 352 nm

c) grosime țintă - 368 nm



Figura 6. Distribuția densității de sarcină pentru ionii de carbon pentru diferite grosimi ale țintei

Locul unde începe colimarea fasciculului este din ce în ce mai departe de țintă odată cu creșterea grosimii și a razei de curbură a acesteia. De asemenea se poate observa că densitatea particulelor retroîmprăștiate crește odată cu creșterea grosimii țintei.

Asemănarea dintre rezultatele noastre și rezultatele raportate anterior în literatura de specialitate validează acuratețea codului PICLS în studierea problemelor propuse în acest proiect.

## Concluzii

Obiectivele propuse în această fază au fost îndeplinite. În cadrul acestei faze au fost realizati urmatorii indicatori in cadrul procesului de diseminare:

## Articole:

1. I. Nicoara and M. Stef, "Charge compensating defects study of YbF3 doped BaF2 crystals using dielectric loss", Physica Status Solidi b, accepted 2015.

2. R. Negrila, M. Paulescu, D. Vizman, Irradiation of materials for space radiation studies, in *Materials in extreme environments for energy, accelerators and space applications at ELI-NP, Technical Design Report-HPLS-TDR4*, edited by D.Ursescu, T.Asavei, M. Bobeica, M. Cernaianu, M. Tomut, to appear in Romanian Reports in Physics.

# Participari la conferinte:

#### TIM14 Physics Conference, Timisoara, Romania, 20-22 November 2014

- *D. Tatomirescu, G. Pascu, A. Popescu, D. Vizman* PIC method in numerical simulation of laser-plasma interaction
- *M. Paulescu, R. A. Negrila, D. Vizman* Overview about solar cells degradation in space
- *F. Cirlan, M. Stef, G. Buse, M. Bunoiu, I. Nicoara* Influence of YbF3 concentration on the dislocation density on (111) surface of YbF3 doped BaF2 crystals

# The 8th International Conference On Advanced Materials, ROCAM 2015, Bucharest, Romania, 7-10 July 2015

- *D. Tatomirescu, A. Popescu, G. Pascu, D. Vizman* The PIC method for laser-plasma acceleration numerical modeling with possible applications in materials evaluation
- *M. Stef, I. Nicoara* Dislocation density and etch pits morphology on cleavage plan of YbF3 doped BaF2 crystals

# The 4th International Conference on the Physics of Optical Materials and Devices, Budva, Montenegro 31 August - 4 September 2015

• *M. Stef, I. Nicoara* - Growth And Spectroscopic Characterization Of YbF3 Doped BaF2 Crystals

## 5th European Conference on Crystal Growth ECCG5, Bologna, Italy, 9-11 September 2015

- *I. Nicoara, M. Stef, O. Bunoiu* Study of charge compensating defects in BaF2:YbF3 crystals using dielectric relaxation
- *I. Nicoara, M. Stef, O. Bunoiu* Some optical properties of YbF3 doped BaF2 crystals

#### Participari la Scoli de vara:

1.D. Tatomirescu attended the International Summer School on Materials for Energy Conversion, Bucharest, 6-11 July 2015
2.D. Tatomirescu attended the First ELI-NP Summer School - Perspectives in Physics with High Power Lasers and Gamma Beams, Bucharest - Magurele, 21-25 September 2015

#### Vizite de studiu:

1.D. Tatomirescu and G. Pascu - Research internship on Particle-In-Cell simulations of high intensity laser plasma interaction at Centre Lasers Intenses et Applications, CELIA, Bordeaux, France under the supervision of Associate Professor Emmanuel d'Humières

#### Participari la seminarii stiintifice:

 1.D. Vizman, D. Tatomirescu, G. Pascu, R. A. Negrila and A. Popescu attended the Scientific Seminar "Numerical simulation of laser ion acceleration - State of the art and perspectives" held by E. d' Humières at ELI-NP, Bucharest - Magurele, 20-21 October 2014
 2. D. Tatomirescu, G. Pascu and A. Popescu attended the Scientific Seminar "On the prospects of laser driven hadron therapy" held by S. V. Bulanov at ELI-NP and IFIN-HH, Bucharest -Magurele, 30 July 2015