

ANEXA II – Formulare B (modele)
Formularul B1_RO - Rezumatul proiectului

Programul/Subprogramul/Modulul	5/5.1/ELI-RO
Tipul proiectului	CDI
Tematica ELI-NP	5.6.11. Positron-excited Auger Electron Spectroscopy (PAES)
Titlul proiectului / Acronimul	Știința suprafețelor folosind pozitroni: optimizarea moderatorilor cu Ne solid și primele experimente PAES / SuSciPo
Durata proiectului	36 luni

REZUMATUL PROIECTULUI

Acest proiect își propune să străpungă un pas decisiv în vederea implantării Științei Suprafețelor la ELI-NP, mai precis să investigheze care sunt condițiile optime pentru moderarea pozitronilor și care sunt, realist vorbind, intensitățile din spectroscopia de electroni Auger produși prin anihilarea pozitronilor (PAES). Fluxul de pozitroni anticipat a fi produs la ELI-NP, de cca. $10^8 - 10^9$ pozitroni/s este echivalent cu o sursă de 3-30 mCi. În condițiile unei moderări eficiente a acestui flux, pe cât posibil peste 1 %, cantitatea de pozitroni moderați poate fi suficientă pentru a fi exploatabilă în vederea obținerii de spectre PAES cu raport rezonabil semnal/zgomot (1 %) în timp rezonabil, de la câteva minute la zeci de minute. Aceste spectre pot fi exploatate în mod decent pentru a se monitoriza reacțiile chimice de suprafață sau pentru a se investiga cantități mici de adsorbați (sub 1 % dintr-un strat atomic) pe suprafețe. În consecință, un pas esențial de făcut este realizarea unor asemenea moderatorii eficienți. Acesta va fi primul obiectiv, esențial, al proiectului, folosindu-se o sursă de laborator ^{22}Na . Al doilea obiectiv este validarea metodei PAES folosindu-se surse de laborator pentru a se obține rezultate de calitate, care ar putea fi folosite pentru a atrage atenția comunităților de știința suprafețelor, cataliză, energetică, științe ale mediului, către experimente la facilitatea de pozitroni (E3) la ELI-NP.

Neonul solid este recunoscut a fi ce mai bun moderator de pozitroni, din cauza benzii interzise enorme (21,7 eV) combinată cu faptul că Ne este cel mai ușor gaz rar care poate fi condensat, deci atomii de Ne au mobilitate ridicată și sunt capabil să se re-organizeze în structuri de cristalinitate ridicată la tratamente termice. Astfel, pot fi sintetizate matrici de Ne cu o scăzută cantitate de defecte sau spații goale, iar aceste matrici este de așteptat să aibă un drum foarte scurt al pozitronilor care pierd energie prin excitații electronice, și un parcurs lung al pozitronilor ,epitermici' care nu mai pot pierde energie decât prin împrăștiere pe defecte sau prin interacțiunea cu vibrațiile rețelei. Aceasta conduce la un număr crescut de pozitroni de energie scăzută care pot părăsi cristalul. Cu toate acestea, contaminarea în suprafață sau în volum a cristalelor de Ne este detrimentală pentru eficiența de moderare a pozitronilor, în consecință de foarte mare importanță este presiunea (vidul) în care operează aceste experimente; această presiune trebuie să fie cât mai scăzută posibil, în domeniul 10^{-11} mbar. Un al doilea pas care trebuie parcurs este caracterizarea în energie a acestor pozitroni moderați; cazul ideal este acela al unui flux intens de pozitroni de energie scăzută cu o distribuție ascuțită în energia cinetică. Asemenea experimente nu au fost efectuate până în prezent, deci ne propunem să le efectuăm noi, folosind un analizor cu oglinzi cilindrice retractabil (R-CMA) de concepție originală. Cu ajutorul R-CMA și cu utilizarea combinată a XPS și AES (înregistrând și compoziția gazului rezidual din camera de analiză), se pot corela caracteristicile de preparare a matricilor de Ne cu spectrele pozitronilor emiși; sperăm ca această procedură de optimizare să se traducă într-un factor de mai multe unități în eficiența de moderare, actualmente limitată în jur de 1 %.

Odată sursa de pozitroni moderați operațională, o vom folosi în mod extensiv pentru spectroscopie PAES. Se va porni cu un sistem ,standard' (metale depuse pe metale) cu mecanism de creștere strat cu strat, apoi se vor analiza reacțiile de oxidare ale anumitor metale (elemente din grupele 11 și 12). Apoi, se va aborda cazul suprafețelor feroelectrice, pentru care PAES pare să fie cea mai potrivită tehnică de a se determina curburile de bandă la suprafețe, din cauza sensibilității la suprafață extreme. După aceasta, se vor analiza interdependențele dintre procesele de adsorbție moleculară și starea de polarizare a acestor suprafețe, un domeniu intens investigat în momentul de față, dar nu prin PAES. Următorul experiment va analiza heterostructuri formate de grafenă sau alte materiale 2D pe suprafețe feroelectrice, de asemenea un subiect ,cald'. Practic, odată metoda PAES validată, o mare varietate de experimente pot fi propuse, iar noi vom fi atenți la sugestiile comunității științifice. Proiectul va propune, de asemenea, modalități și aparatură de diagnoză a matricilor de Ne, pentru optimizarea eficienței de moderare și pentru proiectarea facilității PAES de la ELI-NP.