

AUTOREFERAT

Marcin Turek

Lublin 2015

1. Dane osobowe¹

Imię i nazwisko: Marcin Turek
Data i miejsce urodzenia: 5 kwietnia 1974, Nałęczów
Stanowisko: adiunkt
Miejsce zatrudnienia: Instytut Fizyki,
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki,
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie,
pl. Marii Curie-Skłodowskiej 1, 20-031 Lublin.

2. Posiadane wykształcenie, posiadane dyplomy i stopnie z podaniem roku i miejsca ich uzyskania:

- 1993 r. egzamin dojrzałości w Liceum Ogólnokształcącym im. S. Żeromskiego w Nałęczowie w klasie o profilu ogólnym.
- 1998 r. tytuł zawodowy magistra fizyki w zakresie fizyki teoretycznej uzyskany z wyróżnieniem na Wydziale Matematyki i Fizyki UMCS po ukończeniu studiów magisterskich w latach 1993-1998; praca magisterska pt. „*Poza twierdzenie Ehrenfesta - ewolucja czasowa stanów koherentnych w prostych układach fizycznych*” wykonana w Zakładzie Fizyki Matematycznej Instytutu Fizyki UMCS pod kierunkiem prof. dra hab. Andrzeja Góździa.
- 2003 r. stopień doktora nauk fizycznych uzyskany na Wydziale Matematyki i Fizyki UMCS po ukończeniu studiów doktoranckich w latach 1998-2003.
Rozprawa doktorska „*Efekty relatywistyczne w ewolucji paczek falowych*” napisana pod kierunkiem prof. dra hab. Piotra Rozmeja.

3. Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych:

2003-obecnie: zatrudniony na stanowisku adiunkta (Instytut Fizyki, Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, pl. Marii Curie-Skłodowskiej 1, 20-031 Lublin)

4. Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65, poz. 595 ze zm.):

a) tytuł osiągnięcia naukowego:

Fizyczne aspekty wytwarzania wiązek jonowych – modelowanie numeryczne

b) autorzy i tytuł publikacji², nazwa czasopisma i inne dane bibliograficzne

- H1. M. Turek, *Ionization of short-lived isotopes in a hot cavity - Numerical simulations* Vacuum 104 (2014) 1
H2. M. Turek, *Effects of Electron Impact on Ionization of Short-Lived Isotopes in a Hot Cavity*, Acta Physica Polonica A 125 (2014) 1384
H3. M. Turek, A. Drożdziel, K. Pysznik, S. Prucnal, D. Mączka, *Production of Mo⁺ Beams Using an Arc Discharge Ion Source*, Acta Physica Polonica A 125 (2014) 1388

¹ Przygotowano według szablonu dostępnego na stronie Centralnej Komisji do Spraw Tytułów i Stopni Naukowych: http://www.ck.gov.pl/images/PDF/komunikaty/wzor_autoreferat.pdf

² Spis wszystkich publikacji, których jestem autorem bądź współautorem można znaleźć w załączniku 3.

- H4. M. Turek, *Surface Ionization of Radioactive Nuclides - Numerical Simulations* Acta Physica Polonica A 123 (2013) 847
- H5. M. Turek, A. Drożdziel, K. Pyszniak, D. Mączka, B. Słowiński, *Production of Doubly Charged Ions Using a Hollow Cathode Ion Source with an Evaporator* Acta Physica Polonica 123 (2013) 843
- H6. M. Turek, D. Drożdziel, K. Pyszniak, D. Mączka, B. Słowiński, *Simulation of ionization in hot cavity surface ion source* Review of Scientific Instruments 83 (2012) 023303
- H7. M. Turek, A. Drożdziel, K. Pyszniak, S. Prucnal, D. Mączka, Yu. Yushkevich, A. Vaganov, *Plasma Sources of Ions of Solids*, Instruments and Experimental Techniques 55 (2012) 469
- H8. Y.V. Yushkevich, M. Turek, D. Mączka, K. Pyszniak, B. Słowiński, Y.A. Vaganov, J. Zubrzycki *Working parameters of the electron-beam-generated ion source for ISOL facilities*, Nukleonika 57 (2012) 351
- H9. M. Turek, A. Drożdziel, K. Pyszniak, D. Mączka, *Wytwarzanie jonów podwójnie naładowanych w plazmowym źródle jonów z parownikiem* Przegląd Elektrotechniczny 88(11b) (2012) 328
- H10. M. Turek, A. Drożdziel, K. Pyszniak, S. Prucnal, *Compact hollow cathode ion source with an internal evaporator*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A 654 (2011) 57
- H11. M. Turek, S. Prucnal, A. Drożdziel, K. Pyszniak, *Versatile plasma ion source with an internal evaporator*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B 269 (2011) 700
- H12. M. Turek, *Modeling of ionization in a spherical surface ionizer*, Acta Physica Polonica A (2011) 120 188
- H13. M. Turek, *Symulacje transportu jonów H- wytworzonych poprzez jonizację powierzchniową*, Elektronika 52(11) (2011) 64
- H14. M. Turek, S. Prucnal, A. Drożdziel, K. Pyszniak, *Arc discharge ion source for europium and other refractory metals implantation*, Review of Scientific Instruments 80 (2009) 043304
- H15. M. Turek, K. Pyszniak, A. Drożdziel, *Influence of electron impact ionization on the efficiency of thermoemission ion source*, Vacuum 83 (2009) 260
- H16. M. Turek, J. Sielanko, *Simulations of negative ion extraction from a multi-aperture ion source in the presence of the magnetic filter*, Vacuum 83 (2009) 256
- H17. M. Turek, K. Pyszniak, A. Drożdziel, J. Sielanko, A. Latuszyński, D. Mączka, Y. A. Vaganov, Y. V. Yushkevich, *Numerical model for extraction of ions from plasma*, Instruments and Experimental Techniques 52 (2009) 90
- H18. M. Turek, M. Brzuszek, *Parallel Monte Carlo code for modelling of high temperature ion sources*, Polish Journal of Environmental Studies 18(3B) (2009) 373
- H19. M. Turek, K. Pyszniak, A. Drożdziel, J. Sielanko, *Ionization efficiency calculations for cavity thermoionization ion source*, Vacuum 82 (2008) 1103
- H20. M. Turek, M. Brzuszek, J. Sielanko, *Hybrid MPI/openMP approach to the parallelisation of ion source plasma simulations*, Polish Journal of Environmental Studies 17 (2008) 495
- H21. M. Turek, J. Sielanko, *A 3D computer simulation of negative ion extraction influenced by electron diffusion and weak magnetic field*, AIP Conference Proceedings, 993 (2008) 61
- H22. A. Latuszyński, K. Pyszniak, A. Drożdziel, M. Turek, D. Mączka, J. Meldison, *Atom ionization process in the thermoionization ion source*, Vacuum 81 (2007) 1150
- H23. A. Pyszniak, A. Drożdziel, M. Turek, A. Latuszyński, D. Maczka, J. Sielanko, Yu.A. Vaganov, Yu. V. Yushkevich, *Extraction of ions from a plasma source and formation of beams*, Instruments and Experimental Techniques 50 (2007) 552
- H24. M. Turek, M. Brzuszek, J. Sielanko, *An MPI-based parallel code for high performance 3-D particle-in-cell ion source plasma simulation* Annales UMCS Informatica AI 6 (2007) 137
- H25. M. Turek, J. Sielanko, P. Franzen, E. Speth, *Influence of transversal magnetic field on negative ion extraction process in 3D computer simulation of the multi-aperture ion source* AIP Conference Proceedings 812 (2006) 153

5. Omówienie wymienionych prac ze wskazaniem celów naukowych, wyników i możliwości ich ewentualnego zastosowania.

A. Modelowanie źródeł jonów ujemnych z wykorzystaniem metody Particle-In-Cell

Po zakończeniu studiów doktoranckich i uzyskaniu stopnia doktora w 2003 r. zostałem zachęcony przez prof. Juliusza Sielanko do podjęcia w swych badaniach m.in. tematyki modelowania źródeł jonów. Wiązało się to dla mnie z diametralną zmianą obszaru zainteresowań, jednakże zdecydowałem się podjąć to wyzwanie, mając na uwadze m.in. fakt, że prof. Sielanko intensywnie współpracuje z grupą kierowaną przez dra Eckeharta Spetha w renomowanej instytucji jaką jest Max-Planck-Institut für Plasmaphysik w Garching. Ogromną motywacją była możliwość współuczestniczenia w badaniach nad wytwarzaniem wiązek cząstek mających posłużyć ogrzewania plazmy w reaktorze termojądrowym powstającym w ramach jednego z najambitniejszych projektów (ITER) podjętych przez międzynarodową wspólnotę naukowców. ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor) [1-4] będzie pierwszym eksperymentalnym reaktorem z magnetycznym pułapkowaniem plazmy, który ma w praktyce zademonstrować możliwość wykorzystywania energii termojądrowej dla potrzeb energetyki (planuje się, że stosunek energii otrzymywanej z procesu fuzji do całkowitej energii dostarczonej celem jej wszczęcia ma sięgać 10, co więcej, po osiągnięciu zapłonu wszelkie systemy grzania będą mogły być odłączone). Budowa reaktora w Saint Paul-lez-Durance, niedaleko od CEA Cadarache, trwa od 2010 r. Ewentualny sukces projektu ITER otworzy drogę do budowy demonstracyjnej elektrowni DEMO o mocy 2-4 GW, tym samym dając początek nowej gałęzi energetyki, mogącej realnie sprostać wyzwaniom stawianym przez rozwój demograficzny i gospodarczy (nawet najbardziej proekologiczne modele przewidują podwojenie zapotrzebowania na energię w ciągu XXI stulecia, modele zakładające spontaniczny rozwój mówią raczej o wzroście czterokrotnym [5]). Najbardziej obiecujące dla potrzeb energetyki termojądrowej wydaje się wykorzystanie mieszanek deuteru i trytu:



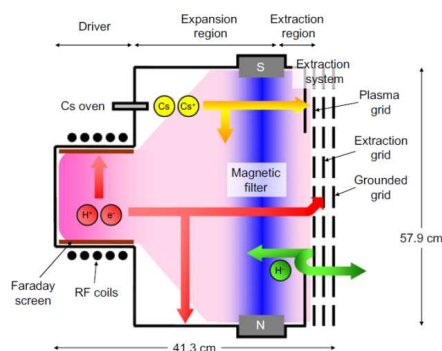
ze względu na stosunkowo nisko położone (70 keV) maksimum przekroju czynnego i wysoką wydajność energetyczną. By wspomniany proces mógł zachodzić, konieczne jest dostarczenie odpowiednio dużo energii jądom atomowym, tak, by możliwe stało się pokonanie kulombowskiej bariery energetycznej. Możliwość uzyskania samopodtrzymującej się reakcji termojądrowej w plazmie opisana jest tzw. kryterium Lawsons, zawierający potrójny iloczyn gęstości plazmy n , jej temperatury T i czasu utrzymania energii τ .

$$n T \tau \geq 10^{21} \text{ keV s/m}^3. \quad (2)$$

Plazma o gęstości rzędu 20^{20} m^{-3} i temperaturze $\sim 20 \text{ keV}$ utrzymywana będzie dzięki zespołowi potężnych cewek poloidalnych i toroidalnych wytwarzających pole magnetyczne o indukcji rzędu 5 T. Uzyskiwanie tak wysokich temperatur plazmy jest możliwe dzięki zastosowaniu rozmaitych technik: grzania omowego [6], grzania przez emisję fal elektromagnetycznych ICRH/ECRH Ion/Electron Cyclotron Resonant Heating [7-9] oraz grzania przez wstrzykiwanie strumienia cząstek neutralnych NBI [10] (Neutral Beam Injection). ITER będzie wyposażony w dwa zasadnicze systemy NBI, każdy dostarczający $\sim 33 \text{ MW}$ mocy do wnętrza reaktora poprzez wstrzykiwanie obojętnych atomów D i H o energiach rzędu setek keV. Ze względu na silne pola magnetyczne wewnątrz plazmy wstrzykiwanie cząstek naładowanych jest niemożliwe, wytworzona wiązka jonowa musi zostać zneutralizowana, a następnie pozbawiona jonów reszkowych przed jej ostatecznym skierowaniem do portu w komorze tokamaka. Ponieważ energie wstrzykiwanych jonów sięgają setek keV (m.in. po to, by utrzymać optymalny stosunek jonów deuteru i trytu w plazmie [11]) to stosowanie wiązek jonów dodatnich jest niecelowe, gdyż przekrój czynny na neutralizację jonów H^+ i D^+ przy energiach rzędu setek keV jest bardzo niski [12], w odróżnieniu od wydajności neutralizacji jonów H^- czy D^- . Krytycznym problemem

przy konstruowaniu systemu NBI jest uzyskiwanie intensywnych wiązek jonów ujemnych. Jony te powstają w komorze źródła jonów, w której plazma ma gęstość rzędu $10^{17} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ a zatem ich średnia droga do momentu neutralizacji jest rzędu kilku centymetrów, co skutkuje faktem, że na ekstrahowane mogą być jedynie jony powstałe w niezbyt dużej odległości od obszaru ekstrakcji. Poważny problem stanowi też efektywne pozbycie się elektronów z wiązki jonów ujemnych, do czego wykorzystuje się filtry magnetyczne w obrębie siatek ekstrakcyjnych.

Źródło jonów ujemnych opracowane w IPP Garching [13-15] jest konstrukcją, której zastosowanie jest przewidywane dla potrzeb systemów NBI reaktora ITER. Plazma powstaje w obszarze wyładowania (ang. *driver*) o częstotliwości radiowej (1 MHz, $\sim 100 \text{ kW}$). Jej temperatura w tym rejonie sięga 10 eV, a gęstość 10^{18} m^{-3} . Po przedostaniu się do obszaru ekspansji jej temperatura spada do $\sim 1 \text{ eV}$ a gęstość do $\sim 10^{17} \text{ m}^{-3}$.



Rys. 1. Schemat źródła jonów H^-/D^- opracowanego w IPP Garching.

W obszarze ekspansji (rys. 1.) zachodzi produkcja jonów ujemnych w tzw. procesie objętościowym, podczas zderzeń wysokowzbudzonych molekuł wodoru z elektronami [16]:



W tym też obszarze zachodzą procesy prowadzące do utraty jonów ujemnych, z których najważniejsze wydaje się zderzenie z elektronem prowadzące do utraty elektronu nadmiarowego [17]:



Możliwe jest także zachodzenie reakcji odłączenia elektronu w zderzeniach H^- z obojętnymi atomami wodoru i jonami H^+ [16].

Kolejny ważny proces prowadzący do powstawania jonów ujemnych zachodzi na powierzchni pierwszej siatki (PG-Plasma Grid) pokrytej cienką warstwą cezu, wyparowywanego do wnętrza źródła przy pomocy piecyka o regulowanej temperaturze. Niska praca wyjścia cezu ($\sim 2 \text{ eV}$) umożliwia powstawanie jonów H^- w zderzeniach jonów H^+ , H_2^+ i atomów H z powierzchnią pokrytej nim siatki. Z perspektywy lat badań okazało się, że proces powierzchniowy może mieć decydujący przyczynek do ekstrahowanych natężeń prądów jonów H^- , aczkolwiek wpływ procesu objętościowego na zjawisko formowania się menisku jest istotny, a zatem jego uwzględnienie jest konieczne dla zrozumienia wpływu pola magnetycznego na wydajność ekstrakcji.

Jak to już było wcześniej wspomniane, wyeliminowanie elektronów z ekstrahowanej wiązki jest jednym z najtrudniejszych zadań w opracowaniu efektywnego źródła jonów ujemnych - ekstrahowanie dużych ilości elektronów prowadzi do znacznego zużycia mocy przez układ akceleracji wiązki, jak również może prowadzić do przegrzewania się siatek nadmiernie bombardowanych przez strumień elektronów. Aby uporać się z tym problemem stosuje się specjalne filtry magnetyczne. Jeden z nich, o indukcji do 7 mT obejmuje region pomiędzy obszarem ekspansji i pierwszą siatką. Drugi, znacznie silniejszy filtr generowany jest przez magnesy stałe umieszczone wewnątrz siatki ekstrakcyjnej (drugiej z kolei), a jego celem jest pozbycie się elektronów o znacznych energiach. Z uwagi na znaczną różnicę mas filtry magnetyczne nie powinny znacząco zaburzać biegu wiązki jonów H^- .

Celem prowadzonych przeze mnie we współpracy z IPP Garching badań było opracowanie numerycznego modelu zjawisk związanych z ekstrakcją i formowaniem wiązki jonów ujemnych. Model ten

powinien dawać możliwość implementacji geometrii wielootworowych siatek stosowanych w testowanych źródłach jonów, brać pod uwagę zarówno objętościową jak i powierzchniową produkcję jonów, umożliwiać samozgodny opis pól elektrycznych generowanych przez cząstki naładowane, uwzględniać ekstrakcję elektronów, a także umożliwiać badanie wpływu pola magnetycznego pochodzącego od wspomnianych wyżej filtrów na zachowanie zarówno plazmy, jak i ekstrahowanych strumieni jonów i elektronów. Zasadniczym zadaniem, jakie przede mną stało było sprawdzenie w jakim stopniu poprzeczne (względem osi ekstrakcji) pole magnetyczne w obszarze ekstrakcji może wpływać na natężenie wiązek jonów ujemnych i elektronów. Docelowy program powinien umożliwiać symulacje w pełni trójwymiarowe, ze względu na złamanie symetrii układu w którym mamy do czynienia ze skrzyżowanymi polami: elektrycznymi (ekstrakcja) i wzajemnie prostopadłymi magnetycznymi (filtry).

Należy w tym miejscu podkreślić, że w momencie rozpoczęcia opisywanych badań brak było programów numerycznych, które byłyby w stanie sprostać temu zadaniu. Zasadniczą trudność polega na tym, że modelowane miały być zjawiska zachodzące na pograniczu plazmy wypełniającej źródło i obszaru wiązki, biegnącej w zasadzie przez próżnię. Zazwyczaj do opisu obu tych układów używa się odmiennych metod i narzędzi. Pozwolę sobie dokonać ich krótkiego przeglądu. Dostępne pakiety komercyjne jak np. Cobham Vector Fields [18], COMSOL [19] czy IES [20] są stosunkowo łatwe w użyciu, umożliwiają stosowanie zawansowanych metod elementów skończonych, adekwatnych do zagadnień związanych z elektrostatyką i transportem ciepła, jednakowoż ich przydatność w złożonych symulacjach plazmy jest nieco problematyczna [21]. Typowe programy do modelowania plazmy, czy to posługujące się modelami płynowymi czy hybrydowymi pozwalają zazwyczaj na modelowanie rozkładów gęstości poszczególnych składników oraz pola elektrostatycznego, a nawet reakcji chemicznych w przypadku plazmy z dobrze zdefiniowanymi warunkami brzegowymi, czy to skończonymi, czy periodycznymi. Sytuacja, w której obecność np. otworu ekstrakcyjnego wprowadza silną nieliniowość wynikającą z raptownych zmian gęstości plazmy w przestrzeni, w znacznym stopniu ogranicza ich przydatność. Modele kinetyczne i cząsteczkowe [22-24] znacznie lepiej pozwalają się uporać z tego typu nieliniowościami. Mimo rozległego zakresu możliwości oferowanych przez te programy można jednak odnieść wrażenie, że ich twórcy w niewielkim stopniu byli zainteresowani umożliwieniem łatwego modelowania ekstrakcji i biegu wiązek jonów, być może wychodząc z założenia, że dostępne są do tego celu dedykowane programy jak SIMION [25], IGUN/NIGUN [26], KOBRA [27] czy PBGUNS [28]. Z drugiej zaś strony, twórcy wspomnianego oprogramowania do modelowania ekstrakcji i biegu wiązek jonowych, zakładają zazwyczaj, że powierzchnia emitująca wiązkę jonową musi być zdefiniowana przez użytkownika, w najlepszym razie jej niektóre parametry jak rozkład gęstości jonów są szacowane np. w oparciu o model Selfa [29], w sposób nieliniowy wiążący potencjał plazmy z gęstością ładunku, jak ma to miejsce np. w programach KOBRA lub IBSIMU [30]. Niekiedy twórcy programów do modelowania biegu wiązki jonowej umożliwiają użytkownikom tworzenie własnych skryptów bądź modułów opisujących zjawiska nie ujęte w podstawowej wersji programu. W znacznym stopniu podnosi to elastyczność programu i pozwala na tworzenie wielce użytecznych i ciekawych aplikacji, jak np. tych opisanych w [31-33], jednakże możliwość korzystania z wewnętrznego języka programowania doskonale sprawdzająca się w przypadku śledzenia setek czy tysięcy cząstek nie wystarcza do efektywnego modelowania plazmy, co wymaga jednoczesnego śledzenia milionów jonów i elektronów. Kolejnym ograniczeniem wielu istniejących programów do modelowania ekstrakcji wiązek jonowych IGUN, PBGUNS jest używanie bądź modeli 2D bądź o symetrii cylindrycznej. Dobrym świadectwem pewnego podziału zainteresowań i używanych narzędzi na wspomniane wyżej dwie grupy jest cytata autorstwa Petera Spaedtke (autora programu KOBRA i wybitnego specjalisty w dziedzinie źródeł jonów) w monografii pod redakcją I.G. Browna „The Physics and Technology of Ion Sources” (Wiley, 2004): *PIC codes have also been applied (...) which seems to be unnecessary because of the steady state character of the problem. A knowledge of realistic particle coordinates is essential for a correct simulation*”. Jeśli zatem *gros* procesów decydujących zarówno o powstaniu jonów, ich ekstrakcji, filtrowaniu elektronów itp. zachodzi na pograniczu plazma/wiązka to **poprawny opis tych zjawisk wymaga modelu**

samozgodnego, jednocześnie opisującego obydwie te rejony i interakcje zachodzące między nimi. Taki też był cel moich badań. By stworzyć program, który będzie w sposób samozgodny modelował ekstrakcję wiązki jonów ujemnych (i elektronów) sięgnąłem po program TRQR, z powodzeniem wcześniej wykorzystywany w modelowaniu biegu wiązek jonowych dla potrzeb układu pułapkowania jonów reszkowych w systemie NBI dla ITER, czy wcześniejszym urządzeniu ASDEX-Upgrade [34-36]. Charakterystyka tego programu w zasadzie nie odbiegała od wspomnianych programów w rodzaju SIMION czy KOBRA - umożliwiał on śledzenie wiązki jonów z uwzględnieniem ładunku przestrzennego wiązki, wpływu zadanego pola magnetycznego czy zderzeń z atomami np. gazów reszkowych lub gazu-neutralizatora. Położenia początkowe jonów generowany były w oparciu np. o zadany model menisku o określonych rozmiarach czy krzywiźnie.

Opis numerycznego modelu wykorzystywanego przez gruntownie zmodyfikowany (a w zasadzie napisany na nowo) program TRQR można znaleźć w pracach [H16,H21,H25], przy czym najpełniejsze informacje dotyczące zarówno metod numerycznych jak i zagadnień związanych z jego zrównolegleniem i dostosowaniem do możliwości oferowanych przez współczesne superkomputery czy klastry można znaleźć w [H24]. Dla kompletności przedstawię tu skrócony

opis wykorzystywanego modelu i metod numerycznych.

Model numeryczny i oparty o niego program bazuje na metodzie Particle-In-Cell [37,38], w której jedna cząstka obliczeniowa (makro- bądź pseudo-cząstka) reprezentuje grupę bardzo wielu (typowo 10^3 - 10^9) rzeczywistych cząstek tego samego rodzaju (jonów bądź elektronów) poruszających się w jednakowy sposób. W momencie obliczania trajektorii cząstki przyjmuje się, że ma ona ładunek i masę identyczną jak cząstka rzeczywista, natomiast gdy oblicza się rozkłady gęstości ładunku na siatce obliczeniowej, przypisuje się jej ładunek wszystkich reprezentowanych przez nią cząstek. Cząstce obliczeniowej można przypisać pewien skończony rozmiar i kształt, który decyduje o sposobie przypisywania ładunku do siatki.

- Program numeryczny może wykorzystywać najprostszy i najszybszy numerycznie schemat przypisywania ładunku do najbliższego węzła siatki (NGP - Nearest Grid Point) [N25], jak i bardziej dokładne ale i złożone algorytmy Cloud-In-Cell rozprawdzające ładunek do 8, bądź 27 węzłów siatki [39]. We wspomnianej wyżej pracy wykazałem, że w wielu przypadkach bardziej celowe z punktu widzenia wydajności programu jest zwiększanie liczby cząstek obliczeniowych przy utrzymaniu mniej „gładkiego” algorytmu rozprawdzania ładunku.
- Model wykorzystuje do 4 rodzajów cząstek, w tym elektrony (znacznie różniące się od jonów masą, a więc osiągające większe prędkości). Zaimplementowanych jest wiele schematów umieszczania tych cząstek w obszarze symulacji. Oprócz znanego z poprzednich wersji generowania cząsteczek na powierzchni płaskiej bądź sferycznej, dostępne są też schematy generowania jednorodnej plazmy w obrębie wybranego prostopadłościanu lub walca, przy czym pozycje cząstek i kierunki ich prędkości losowane są w oparciu o algorytmy Monte Carlo.
- Potencjał elektrostatyczny jest znajduwany w oparciu o obliczony uprzednio sumaryczny rozkład gęstości ładunku $\rho(x, y, z)$ jako rozwiązanie równania Poissona:

$$\Delta V(x, y, z) = -\frac{\rho(x, y, z)}{\epsilon_0}, \quad (5)$$

gdzie ϵ_0 to przenikalność elektryczna próżni. Równanie to rozwiązywane jest numerycznie metodą różnic skończonych przy wykorzystaniu klasycznej iteracyjnej metody kolejnych nadrelaksacji (SOR-Successive OverRelaxation) [38]. Warunki brzegowe narzucane są przez kształty i potencjały elektrod, ponadto na krawędziach obszaru symulacji można narzucić warunki brzegowe Dirichleta bądź von Neumana. Więcej informacji o zastosowanej technice rozwiązywania równania Poissona można znaleźć w artykule [N27].

- Model przewiduje definiowanie elektrod o dowolnych w zasadzie kształtach przez generujące je procedury numeryczne.
- Program wykorzystuje prostokątną siatkę numeryczną. Użytkownik musi być świadomy, że rozmiar siatki w przypadku modelowania plazmy metodą PIC musi być mniejszy od długości Debye'a.

- Pole elektrostatyczne znajdowane jest przez numeryczne różniczkowanie potencjału elektrostatycznego. Dodatkowo, użytkownik może zadać statyczny rozkład pola magnetycznego, opisany wzorem analitycznym lub wczytywany z innego programu.
- Równania ruchu cząstek, czyli równania Lorentza:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = q_i \vec{E}(\vec{r}) + q_i \vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}), \quad (6)$$

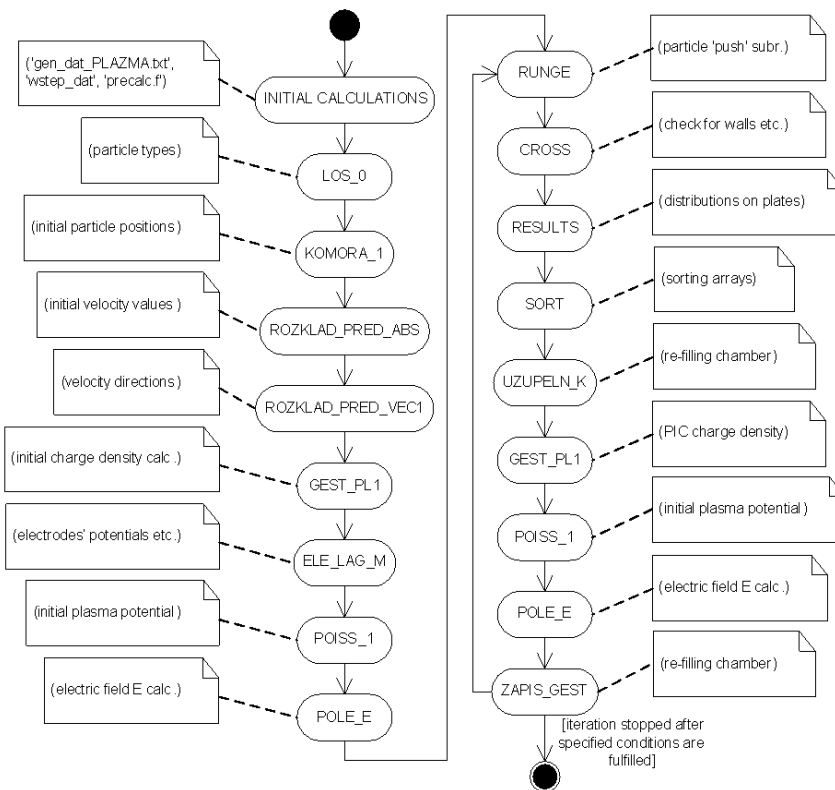
gdzie m_i i q_i to masa i ładunek i -tego rodzaju cząsteczek, całkowane są numerycznie przy wykorzystaniu algorytmu Rungego-Kutty czwartego rzędu [39]. Specjalne procedury sprawdzają, czy cząstki nie zderzyły się z przeszkodami. W razie potrzeby w zastępstwie utraconych cząstek „wstrzykiwane” są do obszaru plazmy nowe cząstki tego samego rodzaju, tak by utrzymać jej stałą gęstość.

- Krok czasu symulacji Δt powinien być dobrany do rozmiaru siatki Δx tak, by spełniony był warunek Couranta-Friedrichsa–Lewy’ego [40]:

$$v\Delta t / \Delta x < 1, \quad (7)$$

gdzie v to typowa prędkość najszybszych cząstek, zazwyczaj elektronów.

- Nowe położenia cząstek wykorzystywane są do znalezienia nowego rozkładu potencjału a cała procedura jest powtarzana aż do uzyskania pożądanego stanu symulacji, np. stanu kwazistacjonarnego, stabilizacji ekstrahowanych prądów itp.

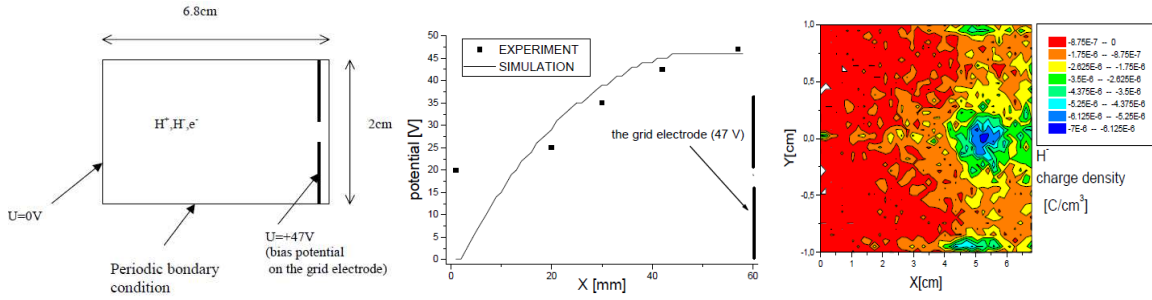


Rys. 2. Schemat blokowy zmodyfikowanego programu TRQR.

Jedne z pierwszych wyników przedstawione zostały w artykule [N27]. Rozpatrywałem w nim stosunkowo uproszczoną geometrię źródła jonów z pojedynczym otworem ekstrakcyjnym i jedną elektrodą (PG - Plasma Grid) o potencjale 47 V (rys 3.). Z racji ograniczeń mocy obliczeniowej dostępnych podówczas komputerów obliczenia wykonane zostały z wykorzystaniem 10^6 pseudocząstek, przy założeniu że plazma o niskiej gęstości (10^{15} cząstek/ m^3) składa się w 50 % z H^+ , 40 % z e^- oraz 10 % z H^- . Z racji niskiej gęstości założono, że można zaniedbać procesy zderzeń między cząstkami a jedynie cząstki uderzające w elektrody są tracone. Mimo tych upraszczających założeń wykazano, że:

- Rozkład potencjału wewnątrz komory uzyskany na drodze obliczeń numerycznych dość dobrze zgadza się z wynikami pomiarów eksperymentalnych na dystansie ~ 5 cm od siatki [42] (rys. 3. w środku).

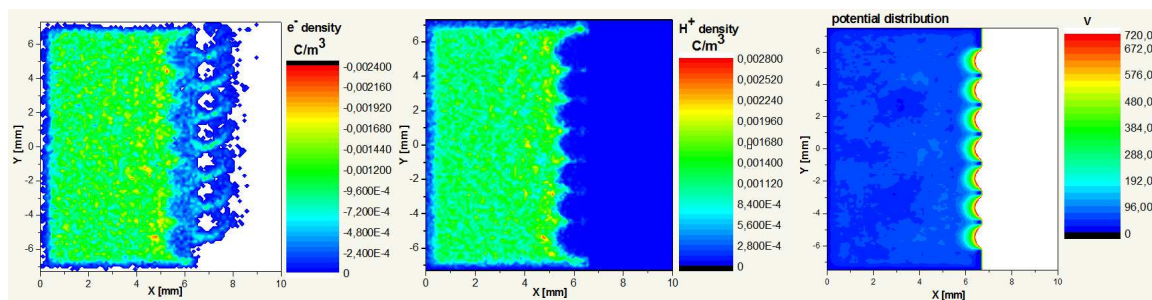
- Podobnie jak w eksperymencie obserwowano dwu- a nawet trzykrotny wzrost koncentracji jonów H^- w pobliżu siatki PG na skutek przyłożenia do niej dodatniego potencjału (rys. 3. po prawej)



Rys. 3. Uproszczona geometria komory plazmowej opisana w [N27] (po lewej). Porównanie rozkładu potencjału wewnątrz komory uzyskanego z modelu numerycznego i w eksperymencie (w środku). Rozkład gęstości jonów H^- wewnątrz komory plazmowej (po prawej).

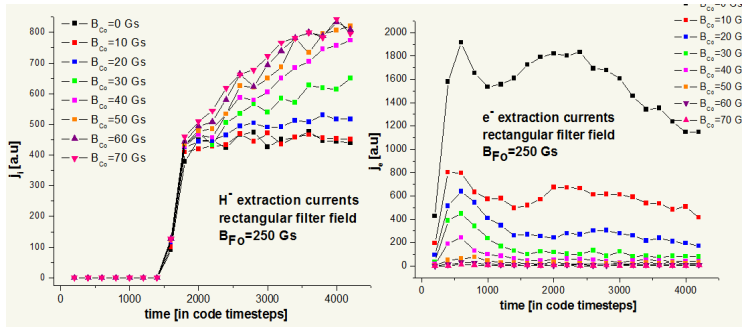
Celem kolejnej pracy [H25] było zbadanie wpływu pola magnetycznego skierowanego poprzecznie do kierunku osi wiązki na ekstrakcję zarówno elektronów jak i jonów ujemnych. Modelowany układ przedstawiony jest na rys 1. [H25] - jest to fragment obszaru ekspansji i ekstrakcji źródła jonów opracowanego w IPP Garching z siatką ekstrakcyjną taką jak prezentowana w [43]. Ponieważ chciałem uwzględnić istnienie wielu otworów i ewentualnie zademonstrować formowanie się złożonego menisku plazmy, zdecydowałem się na stosunkowo duży obszar symulacji - o szerokości rzędu 150 mm. Przyjąłem gęstość plazmy na poziomie 10^{16} m^{-3} , co umożliwiło obliczenia numeryczne z wykorzystaniem 2 mln. pseudocząstek. Przyjąłem, że kwazineutralna plazma jednorodna wewnątrz obszaru zaznaczonego na rys. 1. w [H25] składa się z jonów H^- , H^+ i elektronów w proporcjach 0.05/0.5/0.45. Konfiguracja filtrującego pola magnetycznego zaprezentowana jest na rys. 2 w [H25] - silniejsze (tzw. filtrujące) pole magnetyczne o indukcji do $B_{Fo}=50 \text{ mT}$ obejmuje obszar w pobliżu elektrody ekstrakcyjnej. Dla uproszczenia przyjmowałem gaussowski bądź prostokątny profil tego pola. Drugie, słabsze pole magnetyczne (tzw. powstrzymujące) o indukcji do $B_{Co}=7 \text{ mT}$ sięgało do wnętrza komory plazmowej, zajmując obszar od $x = 40 \text{ mm}$. Zasadniczym celem obliczeń było zbadanie wpływu wspomnianych pól magnetycznych na natężenia prądów ekstrahowanych wiązek jonów H^- i elektronów, mierzonych po minięciu trzeciej elektrody. Najważniejsze uzyskane wyniki są następujące:

- Jako pierwsze przeprowadziłem obliczenia wpływu pola filtrującego. Jak widać na rys. 4. pole magnetyczne zakrzywia tory elektronów powodując że zderzają się one głównie ze ściankami drugiej siatki (zawierającej w rzeczywistym źródle magnezy stałe). Pole magnetyczne nie wpływa istotnie na cięższe jony. Na rozkładach gęstości jonów H^+ i potencjału elektrostatycznego widać formowanie się złożonej struktury wielokrotnych menisków plazmy.



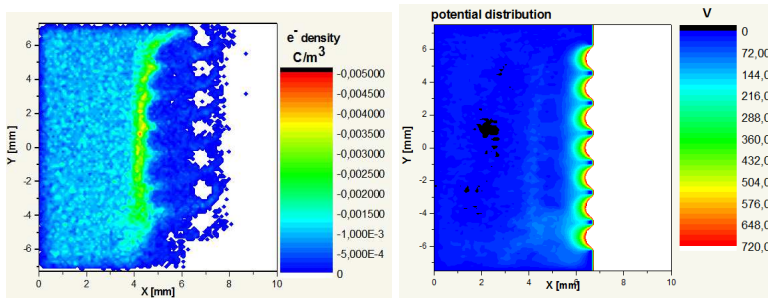
Rys. 4. Rozkłady gęstości ładunku elektrycznego elektronów (na lewo) jonów H^+ (w środku) oraz potencjału elektrycznego w komorze plazmy. Wyniki modelowania numerycznego w przypadku $B_{Fo}=25 \text{ mT}$ po 4200 iteracjach.

- Natężenie ekstrahowanego prądu elektronów szybko maleje wraz ze wzrostem B_{Fo} , co widać na rys. 3a w [H25]. Pole filtrujące o $B_{Fo}=25$ mT redukuje prąd elektronów do około 1% wartości uzyskiwanej w przypadku bez filtra. Pole filtrujące ma znikomy wpływ na uzyskiwane wartości natężenia prądów H^- , zmiany są na poziomie kilku procent nawet dla $B_{Fo}=50$ mT (patrz rys. 3b w [H25]).
- Zaskakujący może się wydawać wpływ dodatkowego, słabego poprzecznego pola magnetycznego w obszarze komory ekspansji (pola powstrzymującego). Obliczenia przeprowadziłem dla B_{Co} w zakresie do 7 mT. Dodatkowe pole przyczynia się oczywiście do dalszego zmniejszenia natężenia ekstrahowanego prądu elektronów. Ponadto widoczny jest **wyraźny wzrost natężenia ekstrahowanych jonów H^- wraz z indukcją tego dodatkowego pola** (rys. 5). Dodatkowe pole o $B_{Co} = 5$ mT powoduje wzrost natężenia prądu jonów H^- o około 200 %. Dla większych B_{Co} obserwuje się wysycenie tej tendencji.



Rys. 5. Wpływ poprzecznego pola powstrzymującego o B_{Co} do 7 mT na ekstrakcję jonów i elektronów. Wyniki dla $B_{Co}=25$ mT (rys. 5. z [H25]).

- Wspomniany wyżej efekt wzrostu natężenia prądu jonów H^- można wyjaśnić tendencją plazmy do pozostawania neutralną. Słabe pole magnetyczne stanowi barierę, powstrzymując część elektronów w rejonie filtra (patrz rys. 6.) i utrudniając dopływ elektronów do obszaru ekstrakcji. Aby potencjał w obszarze ekstrakcji pozostawał niezaburzony (co widać na rys. 6.) rolę elektronów w neutralizowaniu ładunku dodatniego przejmują jony H^- , napływając w pobliże otworów ekstrakcyjnych, co skutkuje wzrostem natężenia ekstrahowanej wiązki jonowej.



Rys. 6. Rozkłady gęstości ładunku elektronów (po lewej) i potencjału (po prawej) obliczone dla przypadku $B_{Co} = 7$ mT.

Godne podkreślenia wydaje się, że zaprezentowane powyżej wyniki były w zgodzie z obserwowanym eksperymentalnie wzrostem natężenia ekstrahowanej wiązki jonów ujemnych wraz z natężeniem słabego pola poprzecznego w rejonie ekstrakcji/ekspansji [44]. **Zaprezentowane tu obliczenia były pierwszymi wykorzystującymi model w pełni trójwymiarowy, które potwierdzały i wyjaśniały ten efekt. Uzyskane przeze mnie wyniki były też zgodne z wynikami uzyskanymi przez innych autorów wykorzystujących modele dwuwymiarowe [45-47].**

Zastosowany w artykule [H25] model numeryczny nie uwzględniał kolizji między cząsteczkami, a co w przypadku symulacji uwzględniających pole powstrzymujące mogło prowadzić do nadmiernego gromadzenia się elektronów w obszarze maksimum pola powstrzymującego. Przy dłuższym czasie obliczeń ciśnienie elektronów rosło na tyle, że pokonywały one gwałtownie barierę stawianą przez pole magnetyczne. Ten sztuczny efekt „korka szampana” był niemożliwy na dłuższą metę do zaakceptowania. By go usunąć zaimplementowałem do rozwijanego modelu mechanizm dyfuzji elektronów w poprzek pola magnetycznego

spowodowanej przez ich zderzenia z innymi cząstkami w plazmie. Zastosowany model dyfuzji był bardzo podobny do modelu użytego w pracy [46]: w trakcie każdego kroku iteracji cząstka reprezentująca elektron była przesuwana o pewien dystans δx w poprzek kierunku pola magnetycznego :

$$\delta x = \sqrt{2D\Delta t} \cdot RND, \quad (8)$$

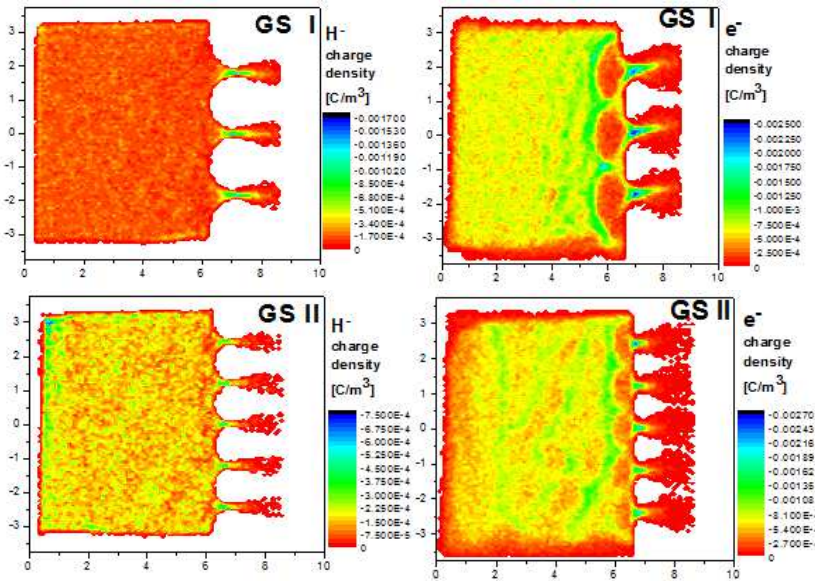
gdzie RND to normalna liczba pseudolosowa, D jest współczynnikiem dyfuzji $D = r_L^2 \nu$, przy czym r_L to promień Larmora, zaś ν to częstość zderzeń z innymi cząstkami [48]. Jak się okazało taka rozbudowa modelu pozwoliła uporać się ze wspomnianym efektem nadmiernego gromadzenia się elektronów w obszarze pola. W kolejnych artykułach zaprezentowałem nowe obliczenia wpływu poprzecznego pola magnetycznego na ekstrakcję jonów H^- . Oprócz uwzględnienia dyfuzji elektronów co ważniejsze zmiany polegały na a) rozpatrywaniu dwu różnych typów siatek ekstrakcyjnych (patrz rys. 1 w [H21]): GS I [23] i GS II (z otworami rozstawionymi w siatce heksagonalnej [49]) b) zmniejszeniu skoku siatki numerycznej o połowę w kierunkach z i y , c) zastosowaniu większej liczby cząstek obliczeniowych (10^7), d) nieznacznym skróceniu liczby iteracji (do 3500) e) rozpatrywaniu tylko jednego pola magnetycznego (tzw. powstrzymującego) o gaussowskim profilu

$$B_z(x, y, z) = B_0 \exp\left\{-\left((x - x_0)/l\right)^2\right\}, \quad (9)$$

gdzie $x_0 = 50$ mm a $l = 20$ mm, o ile nie podano inaczej.

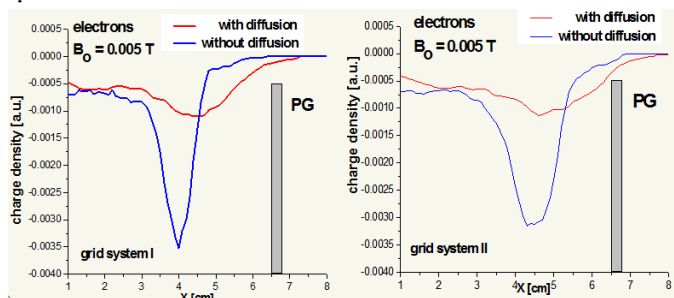
Najważniejsze wyniki, które przedstawiłem w pracach [H21, H16] są następujące:

- Uzyskałem rozkłady gęstości ładunku elektronów i jonów pozwalające na obliczenia natężenia ekstrahowanych wiązek dla obu typów siatek. Pole magnetyczne powoduje spadek potencjału w obszarze gromadzenia się elektronów, w porównaniu do przypadku $B=0$, uwzględnienie dyfuzji powoduje obniżenie potencjału w pobliżu obszaru ekstrakcji, co wynika z ułatwionego napływu elektronów (rys. 1 w [H16]).



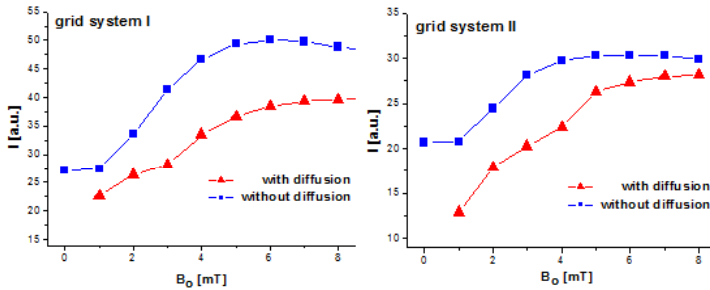
Rys.7. Rozkłady gęstości jonów H^- i elektronów dla dwu różnych typów siatek ekstrakcyjnych.

- Uwzględnienie dyfuzji elektronów pozwoliło zapobiec efektowi nadmiernego gromadzenia się elektronów w obszarze pola powstrzymującego (rys. 8.)



Rys. 8. Gęstość ładunku elektronów obliczona z uwzględnieniem ich dyfuzji i bez brania pod uwagę tego efektu (rys. 5. w [H21]).

- Uzyskałem zależności ekstrahowanego prądu jonów H^- od indukcji magnetycznej pola powstrzymującego (rys. 9.) dla obu typów siatek. **W obu przypadkach obserwowany jest wzrost natężenia prądu H^- do około 200 % przy polu $B_o = 5$ mT.** W okolicach tej wielkości widać wysycenie tendencji wzrostowej. Uwzględnienie efektu dyfuzji obniża nieco obliczoną wartość natężenia pola, efekt ten jest słabszy dla siatki GSII. W przypadku krzywych uzyskanych z uwzględnieniem dyfuzji elektronów efekt wysycenia jest mniej wyraźny.



Rys. 9. Wpływ indukcji poprzecznego pola magnetycznego na natężenie ekstrahowanego prądu jonów H^- (rys. 4 z [H21]).

- Uzyskałem zależności ekstrahowanych prądów jonów H^- i elektronów od czasu dla różnych wartości napięcia ekstrakcyjnego (do 10 kV). Wyniki dla przypadku $B_o = 0$ zaprezentowane są na rys. 2 w [H16]. Krzywe prądowo-napięciowe we współrzędnych $(U_e^{3/2}, I)$ przedstawione są na rys. 3 w [H16]. Widać, że w przypadku $B_o = 0$ mamy do czynienia z przepływem ograniczonym przez ładunek przestrzenny wiązki. W przypadku $B_o = 5$ mT w dużym zakresie napięć ekstrahowane natężenie prądu H^- rośnie niemal dwukrotnie, jednakże widać wysycenie tendencji wzrostu prądu wraz z U_e .
- Szerokość profilu pola magnetycznego ma znikomy wpływ na natężenie ekstrahowanych prądów jonowych (rys. 6 w [H21]).

Należy w tym miejscu wspomnieć, że opisane wyżej obliczenia numeryczne wymagały dość dużej mocy obliczeniowej. Typowy czas obliczeń 4200 iteracji wykorzystujących 1 mln pseudocząstek z wykorzystaniem wydajnego mikrokomputera klasy PC liczony jest w dniach. Aby możliwe było uzyskiwanie bardziej dokładnych rezultatów dzięki obliczeniom angażującym większą liczbę pseudocząstek włożyłem duży wysiłek w przekształcenie programu do postaci zrównoleglonej, umożliwiającej jednoczesne wykorzystywanie wielu procesorów oferowanych przez współczesne klastry, superkomputery a nawet stacje robocze. Najpełniejszy opis struktury zrównoleglonego programu, użytych algorytmów i wyników testowania zawarłem w pracy [H24]. Godne, moim zdaniem, uwagi jest to, że zrównoleglona wersja programu TRQR była w owym czasie jednym z pierwszych stworzonych w Instytucie Fizyki UMCS aplikacji w tak dużym stopniu wykorzystujących maszyny wieloprocessorowe. W znacznym stopniu było to możliwe dzięki udostępnieniu mocy obliczeniowej przez Rechenzentrum Garching, a także Katedrę Fizyki Teoretycznej IF UMCS, którym to jednostkom tą drogą składałem gorące podziękowania.

Program TRQR został zrównoleglony z wykorzystaniem popularnego i powszechnie akceptowanego środowiska MPI (Message Passing Interface) [50]. Zastosowałem strategię rozsyłania grup cząstek do osobnych procesów (ang. *'particle decomposition'*) [51]. Zrównoleglony program testowany był z wykorzystaniem 32-procesorowego węzła superkomputera *Regatta* w Rechenzentrum Garching. Wyniki skalowania zaprezentowane są w pracy [H24]. Skalowanie jest tym bliższe skalowaniu idealnemu, im większa liczba cząsteczek jest używana. Przyczynę od niezrównoleglonej części programu stanowi ograniczenie wartości współczynnika przyspieszenia (ang. *speed-up*)

Mimo tych ograniczeń dokonane przez mnie zrównoleglenie programu pozwoliło na skrócenie typowego czasu obliczeń o rząd wielkości. Prowadziłem też badania nad zrównolegleniem rozwiązywania równania Poissona. Badania te opisałem w pracy [N26]. Jednym z ciekawszych rezultatów zaprezentowanych w tej pracy było wskazanie na konieczności adaptacji wartości współczynnika nadrelaksacji do rozmiaru domeny

(a zatem i liczby użytych procesorów). Zastosowanie tego algorytmu było jedną z metod dalszego zwiększenia efektywności obliczeniowej programu TRQR.

Chcąc jak najwydajniej korzystać z mocy obliczeniowej oferowanej przez maszyny wieloprocessorowe oraz klastry, jak również pozostawać w najnowszym podówczas trendzie łączenia różnych modeli zrównoleglenia programów prowadziłem także badania nad hybrydowym zrównolegleniem programów typu PIC, łączącym zalety środowisk typu *message passing* (jak wspomniany wcześniej MPI) oraz korzystających z pamięci wspólnej (jak OpenMP [52]). Pojawienie się coraz bardziej doskonałych systemów klastrowych, maszyn typu SMP (Symmetric Multiprocessing) zachęciło twórców oprogramowania do łączenia standardów opartych na pamięci wspólnej oraz na przesyłaniu komunikatów w celu uzyskania jak największej wydajności oraz skalowalności aplikacji [53-55]. W pracy [H20] prezentowane jest mieszane podejście, łączące korzyści obydwu strategii, zastosowane do zrównoleglenia szkieletowego dwuwymiarowego programu opartego na metodzie Particle-In-Cell (PIC). Poniżej wymieniam jedynie niektóre z uzyskanych rezultatów:

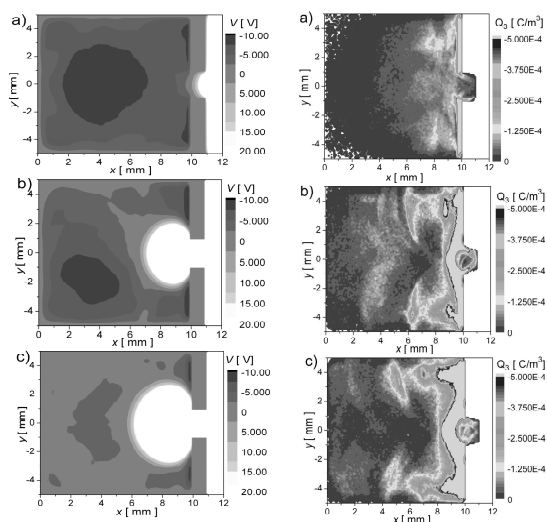
- Wyniki testów przyśpieszenia (rys. 1 b i c. w [H20]) pokazują, że skalowanie jest tym lepsze im większa liczba cząstek obliczeniowych (co jest skutkiem m. in. wpływu narzutów na komunikację). Program skaluje się niemal liniowo aż do 8 CPU.
- Niemal liniowe tzw. *miękkie* skalowanie (rys 2 a i b. w [H20]), świadczy, że zastosowanie zrównoleglenia umożliwia zwiększenie dokładności modelowania.
- Ciekawe są wyniki testów programu zrównolegzonego hybrydowo (MPI+OpenMPI). Testy wykonano dla 16 procesorów na pojedynczym węźle IBM p690. Z rys. 2 c.. wynika, że **program z mieszanym podejściem (OpenMP + MPI) może być znacząco szybszy niż ten sam kod zrównoleglony z użyciem MPI albo OpenMP.**

Wspomniany powyżej model dwuwymiarowy rozbudowałem celem przeprowadzenia symulacji ekstrakcji jonów ujemnych wytworzonych przez jonizację powierzchniową [H13]. Przyjąłem uproszczony model obejmujący komorę źródła i pojedynczą, płaską elektrodę ekstrakcyjną. Założyłem, że ściany komory źródła znajdują się na zerowym potencjale, zaś elektroda ekstrakcyjna ma pewien dodatni potencjał V_{ext} . Obszar symulacji pokryty został siatką prostokątną o rozmiarze 200 na 100 węzłów. Boki komórki siatki mają rozmiary $\Delta x = \Delta y = 0.1$ mm. Komora źródła wypełniona jest równomiernie jednakową liczbą jonów H^+ i elektronów – każda grupa cząstek reprezentowana jest przez $2 \cdot 10^6$ pseudocząstek. Przyjąłem temperaturę plazmy równą 1 eV. Potencjał elektrostatyczny znajdowany był przez rozwiązanie równania Poissona przy użyciu metody kolejnych nadrelaksacji (SOR). Równania ruchu każdej cząstki całkowane są numerycznie przy użyciu prędkościowego algorytmu Verleta [56]. Znając nowe położenia cząstek można ponownie wyznaczyć rozkład gęstości ładunku i powtarzać poszczególne etapy symulacji aż do osiągnięcia przez układ pożądanego stanu. Aby utrzymać stałą gęstość plazmy, tracone elektrony i jony zastępowane są przez nowe cząstki tego samego typu. Uwzględniana jest też produkcja jonów H^- na powierzchni przedniej ściany komory. W każdym kroku symulacji emitowana jest taka sama liczba jonów. Przyjąłem założenie, że wszystkie te jony rozpoczynają swój ruch prostopadłe do powierzchni z jednakowymi prędkościami. Część jonów kieruje się w rejon menisku plazmy i jest wyciągana przez otwór ekstrakcyjny. Program rejestruje liczbę ekstrahowanych jonów H^- . Ponadto jony podlegają nieustannym zderzeniom w plazmie. Proces ten symulowany jest przy wykorzystaniu modelu elastycznych zderzeń binarnych [57].

Najważniejsze uzyskane wyniki opisane w pracy [H13]:

- Po około 2000 kroków ustala się stan kwazistacjonarny. Średnie wartości potencjału są w zakresie od -8 V do -6 V, ekranujące właściwości plazmy powodują, że pole elektryczne w komorze niemal zanika. Widoczne są oscylacje potencjału z częstością własną plazmy (rys. 1a. w [H13]).
- Wraz ze wzrostem potencjału ekstrakcyjnego średni potencjał plazmy w wybranych punktach komory źródła jonów rośnie – do około -2 V przy $V_{ext}=100$ kV (rys 1b.). Warto zwrócić uwagę, że zmiany średnich wartości potencjału są dość złożone: przebieg tych zależności nie jest monotoniczny i ma lokalne maksimum dla $V_{ext}=5$ kV. Porządek krzywych ulega zmianie dla $V_{ext}>70$ kV. Rys. 2a w [H13] przedstawia

ewolucję natężeń ekstrahowanych prądów jonowych I dla różnych wartości V_{ext} . Dla niewielkich V_{ext} charakterystyka prądowo napięciowa jest dość dobrze opisywana przez prawo Childa-Langmuira. Dla $V_{ext} > 10$ kV uzyskiwane natężenia prądu nie rosną już tak szybko z V_{ext} . Dla $V_{ext} > 60$ kV obserwuje się zakres nasycenia charakterystyki. Ma to związek ze wspomnianym wcześniej wzrostem potencjału plazmy – a także ze zmianą rozkładu pola elektrycznego w obszarze ekstrakcji, co powoduje zmiany kierunku przepływu jonów H^- . Dla stosunkowo niewielkich V_{ext} na środku komory jest niewielki dół potencjału – powodujący przemieszczanie się jonów ujemnych w kierunku otworu ekstrakcyjnego. Wraz ze wzrostem V_{ext} ta struktura zanika a menisk wklęsły plazmy wnika coraz głębiej w komorę źródła jonów. Wraz ze wzrostem V_{ext} w rozkładach gęstości jonów H^- pojawiają się włókniste struktury, a zmiany w rozkładzie potencjału powodują że coraz większa część jonów H^- kieruje się w pobliże bocznych ścianek komory, gdzie jest tracona, co jest jedną z przyczyn nasycenia na charakterystyce prezentowanej na rysunku 2b. w [H13].

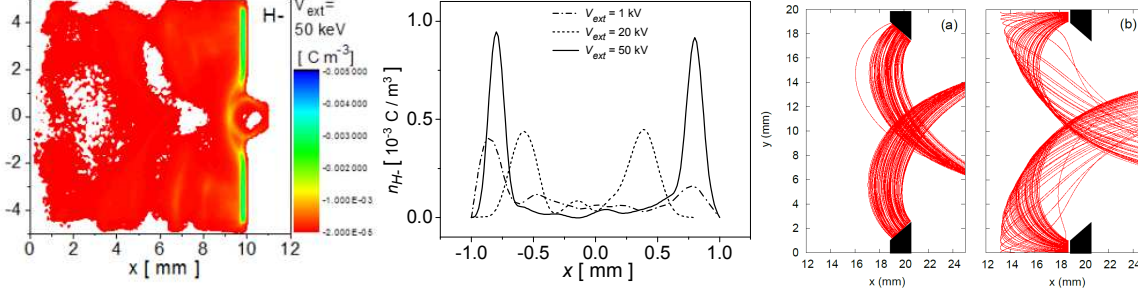


Rys. 10. Rozkład potencjału elektrostatycznego (po lewej) oraz gęstość jonów ujemnych (po prawej) w źródle jonów dla a) $V_{ext} = 1$ kV, b) $V_{ext} = 50$ kV oraz c) $V_{ext} = 120$ kV.

- Badany był także wpływ początkowej prędkości jonów H^- na natężenia prądu uzyskiwanego ze źródła. Wartość prędkości, a więc i początkowej energii kinetycznej jonów pozostaje w związku ze względnymi potencjałami plazmy i elektrody, z której są one emitowane. Obliczenia przeprowadziłem dla dwu wartości napięcia ekstrakcyjnego $V_{ext} = 1$ kV oraz $V_{ext} = 5$ kV, zmieniając energię początkową E_i jonów H^- w zakresie od 0.25 do 1 eV. Rys. 3a w [H13] przedstawia względną zmianę natężenia prądu $\delta I = (I(E_i) - I(E_i = 0.25 \text{ eV})) / I(E_i = 0.25 \text{ eV})$. Widać, że przy czterokrotnym wzroście energii początkowej uzyskiwany prąd rośnie o ok. 10 % dla $V_{ext} = 1$ kV oraz o ok. 20 % dla $V_{ext} = 5$ kV, przy czym w pierwszym przypadku widoczne jest zahamowanie wzrostu prądu już dla $E_i = 0.75$ eV.
- Badałem także związek między tempem produkcji jonów ujemnych a natężeniem ekstrahowanych prądów. Tempo to zależy między innymi od stopnia pokrycia cezem elektrody, na której ma zachodzić jonizacja powierzchniowa. Zjawiska transportu atomów cezu od pieca poprzez plazmę wyładowania wielkiej częstotliwości aż do powierzchni elektrody badane było m.in. w pracy [58]. Założyłem trzy różne szybkości produkcji jonów H^- : $N_s = 600, 800$ lub 1000 pseudocząstek na jedną iterację, odpowiadające różnym stopniom pokrycia. Wyniki dla trzech wartości napięcia ekstrakcyjnego zaprezentowano na rys. 3b [H13]. W badanym zakresie tempa produkcji natężenia ekstrahowanych prądów w niewielkim stopniu rosną z N_s .

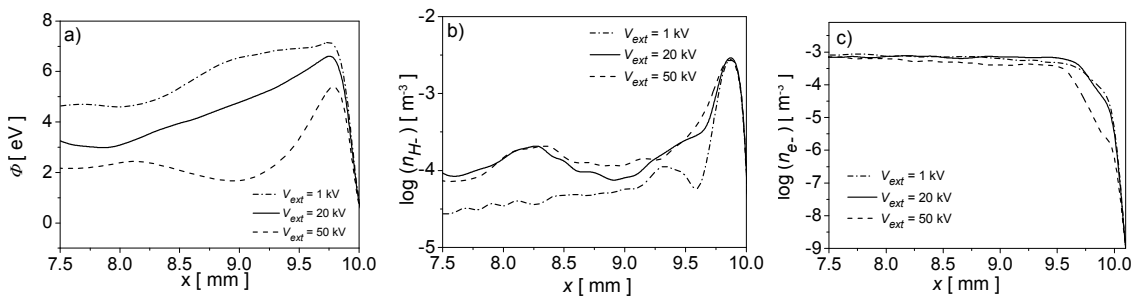
Ostatnimi czasy przeprowadziłem obliczenia ekstrakcji jonów H^- produkowanych powierzchniowo z wykorzystaniem dwukrotnie większej liczby cząstek obliczeniowych i mniejszym krokiem czasowym $\Delta t = 0.5 \cdot 10^{-11}$ s. Wyniki obliczeń przedstawiłem w czerwcu 2015 w trakcie konferencji NEET w Zakopanem, ich publikacja planowana jest na rok 2016. Chciałbym tu zwrócić uwagę na dwa rezultaty:

- wiązka ekstrahowanych jonów ujemnych ma ciekawą strukturę z dwoma wierzchołkami (rys. 11.). Wynika to z faktu, że większość ekstrahowanych jonów pochodzi z obszaru ścianki bezpośrednio przyległego do otworu ekstrakcyjnego. Powoduje to powstawanie łukowatych rozkładów gęstości jonów ujemnych biorących swój początek w krawędziach ścianek. Należy też mieć na uwadze, że do spychania jonów H^- w pobliże krawędzi otworu ekstrakcyjnego przyczynia się ładunek przestrzenny od ekstrahowanych elektronów. Wyniki te są zgodne z rezultatami obliczeń z wykorzystaniem programu ONIX [59].



Rys. 11. Rozkład gęstości jonów H^- (po lewej) profile ekstrahowanej wiązki jonowej (w środku) oraz, dla porównania, trajektorie jonów H^- przewidywane przez program ONIX [59]

- Im większe jest napięcie ekstrakcyjne V_{ext} , tym więcej jonów H^- przedostaje się w głąb komory, przy czym w każdym z rozpatrywanych przypadków największą koncentracją tych cząstek jest w pobliżu powierzchni emitującej, co prowadzi do powstania wspomnianego wcześniej obniżenia potencjału. Najlepiej widać to na rysunku 12., na którym przedstawiono profile wartości energii potencjalnej $\Phi = -eV$ jonów ujemnych i gęstości składników plazmy wzdłuż prostej $y=2.5$ mm w pobliżu powierzchni emitującej. Stosunkowo powolne jony H^- gromadzą się w pobliżu wspomnianej powierzchni tworząc warstwę o grubości około 0.2-0.3 mm, gdyż są więzione w studni potencjału o głębokości kilku elektronowoltów. Gęstość bardziej ruchliwych elektronów jest mniejsza w pobliżu ścianki, w tym rejonie jony H^- przejmują rolę czynnika równoważącego dodatni ładunek jonów H^+ . Należy zwrócić uwagę na fakt, iż głębokość studni maleje od około 7 eV dla $V_{ext} = 1$ kV do 5 eV dla $V_{ext} = 50$ kV, zaś koncentracja jonów H^- w rejonie odległym od ścianki zauważalnie rośnie wraz z V_{ext} . Efekt powstawania studni potencjału i warstwy podwójnej w pobliżu powierzchni emitującej obserwowany był w obliczeniach przeprowadzonych przy użyciu innych modeli [59,60]. Jest to efekt nadmiaru jonów H^- w pobliżu ścianki, jony dodatnie nie są w stanie zrównoważyć ich ładunku.



Rys. 12. Rozkłady energii potencjalnej jonów H^- (po lewej) gęstości jonów H^- (w środku) oraz elektronów (po prawej) w pobliżu powierzchni emitującej jony H^-

Jak już wcześniej wspomniałem, zmodyfikowany **program TRQR uznawany jest za pierwszy trójwymiarowy program oparty na metodzie PIC umożliwiający badanie ekstrakcję wiązek jonów ujemnych** [59]. Dla porównania i pełności opisu chciałbym pokrótce zaprezentować inne narzędzia numeryczne rozwijane i wykorzystywane w tym samym czasie i w kilka lat po modyfikacji TRQR:

- Program rozwijany w laboratorium LAPLACE przez Haagelaara, Boeufa i współpracowników służy do dwuwymiarowych symulacji plazmy w źródle jonów ujemnych w podejściu płynowym [61,62]. W celu opisanego ruchu gazu rozwiązywane jest równanie Naviera-Stokesa, zaś potencjał elektrostatyczny jest znajdowany metodą samozgodną dzięki rozwiązywaniu równania Poissona. Reakcje zachodzące w plazmie uwzględnione są dzięki metodzie Monte Carlo. Pewnym ograniczeniem jest jednak fakt, że program nie uwzględnia powierzchniowej produkcji jonów H⁻.
- Program SLACCAD jest programem opartym o metodę Monte Carlo wykorzystywanym do opisu biegu wiązki jonów ujemnych w obecności pola magnetycznego [63], jednakże z pewnymi ograniczeniami wynikającymi z faktu, iż jest to program 2D. Program ten ponadto nie uwzględnia obecności elektronów. Przy pomocy tego programu prowadzono badania nad optymalizacją układu ekstrakcji wiązki [64,65].
- Program EAMCC to trójwymiarowy kod opisujący transport jonów ujemnych i elektronów w obecności pól: elektrycznego i magnetycznego [66]. Wykorzystując techniki Monte Carlo program bierze pod uwagę szereg możliwych reakcji zachodzących w trakcie zderzeń jonów ze sobą i ściankami siatki ekstrakcyjnej. Program EAMCC nie pozwala na obliczenia pola elektrostatycznego w sposób samozgodny - rozkłady pól otrzymane z innych programów (jak np. SLACCAD) przyjmowane są jako parametry modelu. Program pozwolił m.in. obliczać trajektorie jonów ujemnych i elektronów w ekstrahowanej wiązce jak również moc deponowaną na siatkach elektrod bombardowanych przez odchylane elektrony [64].
- Na podobnej zasadzie funkcjonuje program TrajAn stworzony w IPP Garching [67]. Program nie jest samozgodny: rozkład pola elektrostatycznego obliczany jest przez zewnętrzny program, np. KOBRA, program bierze też pod uwagę rozkład filtrującego pola magnetycznego. TrajAn pozwala na obliczenia prawdopodobieństwa ekstrakcji jonów ujemnych i elektronów układach siatek zawierających wiele otworów, biorąc pod uwagę szereg procesów zachodzących w trakcie zderzeń z przeszkodami i cząstkami. Program umożliwił m.in. analizę porównawczą prawdopodobieństwa ekstrakcji jonów ujemnych produkowanych na powierzchniach różnego typu siatek. Przy jego pomocy zbadano też wpływ pola magnetycznego na prawdopodobieństwo ekstrakcji jonów ujemnych [68].
- Kod opierający się na metodzie PIC, o wymiarowości 1-2D (jeden wymiar przestrzenny i dwa wymiary w przestrzeni prędkości) uwzględniające całą gamę zderzeń w formalizmie Monte Carlo [69-71]. W odróżnieniu od wcześniej wspomnianych programów umożliwiał samozgodne obliczenia pola elektrostatycznego. Uwzględniał zarówno objętościowy, jak i powierzchniowy mechanizm produkcji jonów H⁻. Program ten umożliwił m.in. sprawdzenie wpływu potencjału elektrody plazmowej na przestrzenny rozkład jonów i elektronów. Przeprowadzono również badania wpływu pola magnetycznego na rozkład cząstek naładowanych wokół siatki plazmowej (elektrody pokrytej cezem). Należy zdawać sobie sprawę, że obniżona wymiarowość modelu nie pozwala w pełni odwzorowywać wszystkich zjawisk wywołanych np. przez skrzyżowane pola magnetyczne. Aby usunąć tę trudność, stosunkowo niedawno powstała trójwymiarowa wersja tego programu [72].
- program bazujący na metodzie 2D PIC opisujący ekstrakcję jonów wytworzonych na powierzchni elektrody opracowany przez naukowców związanych z Japońską Agencją Energii Jądrowej [73]. Program umożliwił badania nad meniskiem w otworze ekstrakcyjnym i formowaniem się halo wokół ekstrahowanej wiązki jonów ujemnych.
- Program ONIX stworzony na Uniwersytecie de Sud w Orsay [74-76]. W pełni trójwymiarowy, wykorzystujący metodę PIC program uwzględniający wpływ pola magnetycznego i wykorzystujący metodę Monte Carlo do modelowania różnego typu zderzeń. Jego ogólna struktura przypomina program TRQR - aczkolwiek zastosowano w nim inne algorytmy PIC, rozwiązywania równania Poissona, czy całkowania równań ruchu. Kosztem ograniczenia rozmiaru symulacji do pojedynczego otworu ekstrakcyjnego i wprowadzenia periodycznych warunków brzegowych umożliwiono symulacje przy gęstości plazmy rzędu 10^{17} m^{-3} . Program jest w pełni zrównoleglony i korzysta ze standardu MPI. Program ONIX umożliwił badanie wpływu natężenia pola magnetycznego na ekstrahowane natężenia prądów jonów i elektronów,

obserwację powstawania warstwy podwójnej w sąsiedztwie elektrody emitującej jony H^- , znalezienie optymalnego tempa produkcji jonów H^- na powierzchni elektrody, powyżej którego wydajność ekstrakcji jonów wyraźnie spada i szeregu innych efektów. Po kilku latach wykorzystywania programów PIC o obniżonej wymiarowości oraz programu TrajAn, w pełni trójwymiarowe podejście samozgodne jest z powodzeniem wykorzystywane przez zespół NBI z IPP Garching [77-79].

B. Modelowanie numeryczne źródeł jonów dodatnich

Dokładna znajomość procesów fizycznych związanych z ekstrakcją i formowaniem wiązki jonowej jest niezwykle istotne w takich dziedzinach jak fizyka akceleratorowa, elektromagnetyczna separacja izotopów, spektroskopia jądrowa, czy diagnostyka plazmy [80]. Efektywne formowanie wiązki jonowej wymaga odpowiedniej konfiguracji pola elektrycznego oddziaływującego na powierzchnię emitującą jony, co jest zadaniem o tyle złożonym, że powierzchnia ta tylko w niektórych przypadkach ma ustalony kształt, położenie i potencjał (np. w niektórych źródłach z jonizacją powierzchniową), częściej jednak jej własności ulegają zmianie w zależności od konfiguracji zastosowanego pola elektrycznego, gęstości emitowanego prądu jonowego, gęstości plazmy wewnątrz źródła jonów itp. Ze względu na złożoność wspomnianych zjawisk analityczne rozwiązania opisujące zagadnienia ekstrakcji dla elektronów [81] nie zawsze można zastosować dla źródeł jonów [82], zwłaszcza tych emitujących prądy o dużych natężeniach, jako że: gęstość plazmy i jej potencjał w płaszczyźnie otworu ekstrakcyjnego nie jest jednorodna, a co za tym idzie powierzchnie ekwipotencjalne mogą być zarówno wklęsłe jak wypukłe; ponadto w zależności od gęstości plazmy wewnątrz źródła możemy mieć do czynienia z ekstrakcją wiązki z plazmy bądź zamkniętej w źródle, bądź z plazmy, która z niego wydyfundowała [83,84]. Obliczenia numeryczne, po eksperymentalnej weryfikacji ich rezultatów, są doskonałą metodą pozwalającą na badanie procesów związanych z formowaniem wiązek jonów.

Przedstawiony poprzednio model i oparty na nim program numeryczny mogą być wykorzystywane do modelowania zjawisk zachodzących nie tylko w źródłach jonów ujemnych, ale także np. w klasycznych konstrukcjach z pojedynczym otworem ekstrakcyjnym służących do wytwarzania wiązek jonów dodatnich. Przykład takiego zastosowania opisałem w artykule [H26], poświęconym modelowaniu ekstrakcji i formowaniu wiązki jonowej w plazmowym źródle jonów typu Sideniusa [85], schematycznie przedstawionego na rys. 2 omawianej pracy. Jednym z celów było sprawdzenie, na ile wyniki obliczeń numerycznych są w stanie odtworzyć przebiegi m.in. krzywych prądowo-napięciowych uzyskanych na drodze eksperymentu, oprócz tego w kręgu moich zainteresowań leżało sprawdzenie zachowania rozkładów gęstości poszczególnych składników plazmy w obszarze ekstrakcji źródła.

Wykorzystywany do pomiarów krzywych prądowo-napięciowych zestaw eksperymentalny, bazujący na elektromagnetycznym separatorze izotopów przedstawiony został schematycznie na rys. 1. omawianej pracy. Jako gaz roboczy używano argonu. Natężenie prądu wyładowania utrzymywane było na poziomie 1.2 A. Oprócz omówienia eksperymentu artykuł zawiera zwięzły opis użytego modelu, ze szczególnym uwzględnieniem metody Particle-In-Cell, wykorzystującej najprostszy a zarazem najszybszy schemat (NGP-Nearest Grid Point) przypisywania ładunku do węzłów sieci [N25].

Obszar symulacji pokrywał komorę źródła jonów, fragment elektrody ekstrakcyjnej i obszar pomiędzy nimi (rys. 4. omawianej pracy), co pozwoliło na modelowanie ekstrakcji i formowania wiązki, jak również zliczanie jonów docierających do elektrody ekstrakcyjnej. Geometria i rozkład potencjałów układu eksperymentalnego zostały dość wiernie odtworzone. Plazma złożona z Ar^+ i elektronów ($n_e \sim 5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ - należy zwrócić uwagę, że modelowany jest obszar nie tyle wyładowania, co wnęki katodowej, w którym gęstość plazmy jest nieco niższa) generowana była w obszarze walca o średnicy 4.2 mm i długości 8 mm, co odpowiada rozmiarowi wnęki katody rzeczywistego źródła. W trakcie obliczeń nie uwzględniano efektów związanych ze zderzeniami między cząstkami. Stan kwazistacjonarny osiągany był po kilkuset krokach symulacji ($\Delta t = 3.2 \cdot 10^{-9} \text{ s}$), co widać m.in. na zależnościach natężenia ekstrahowanego prądu od czasu (rys. 5 w [H26]). Warto w tym

miejsu wspomnieć, że ekstrahowane jony zliczane były po minięciu płaszczyzny czołowej otworu elektrody ekstrakcyjnej.

Do najważniejszych wyników zaprezentowanych w [H26] zaliczyć można:

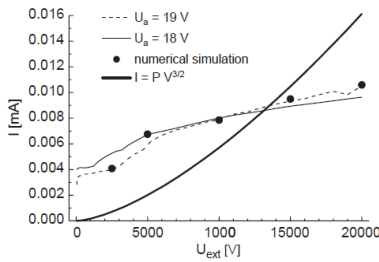
- osiągnięcie zgodności wyników obliczeń numerycznych $I(U_{ext})$ z krzywymi prądowo- napięciowymi zmierzonymi w eksperymencie. Porównanie to zaprezentowane jest na rys. 13. Zawiera on także bardzo często stosowany w opisie wiązek jonowych wykres zależności przewidywanej przez wzór Childa-Langmuira:

$$I = PV^{3/2}, \quad (10)$$

gdzie współczynnik P w przypadku dwu płaskich elektrod

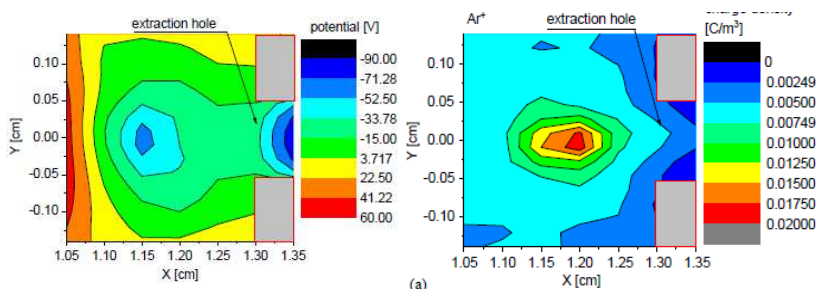
$$P = \frac{4\epsilon_0}{9} \frac{2m}{e} \frac{s}{d^2} \quad (11)$$

nazywany jest perweancją i zależy od odległości między elektrodami d , jak również ich powierzchni s (jednakowej dla każdej z elektrod, w przypadku elektrod płaskich i przepływu równoległego). Należy jednak pamiętać, że prawo Childa-Langmuira opisuje ekstrakcję wiązki w warunkach, gdy ogranicza ją jedynie rozkład ładunku przestrzennego, a nie np. podaż jonów w plazmie generatora wiązki. W rozważanym przypadku zachodzi $P = 5.7 \cdot 10^{12} \text{ A/V}^{3/2}$, a przebieg zarówno eksperymentalnych, jak i obliczonych przy pomocy modelu numerycznego krzywych prądowo-napięciowych jednoznacznie wskazuje, że mamy do czynienia z ekstrakcją ograniczaną przez koncentrację jonów w plazmie w pobliżu otworu ekstrakcyjnego,



Rys. 13. Porównanie krzywych prądowo napięciowych uzyskanych w eksperymencie, dzięki obliczeniom numerycznym, i przewidywanych przez prawo Childa-Langmuira (rys. 3. z [H26])

- Analizując wyniki obliczeń numerycznych zaobserwowano znaczne obniżenie wartości potencjału plazmy w pobliżu otworu ekstrakcyjnego. Obniżenie potencjału wiąże się ze znacznym wzrostem koncentracji elektronów w tym rejonie (patrz rys 7a omawianej pracy). Istnienie tego skupiska jest skutkiem interakcji między polem elektrody ekstrakcyjnej, oraz pól m.in. od katody i anody, których wpływ nie jest zanedbywalny ze względu na stosunkową dużą długość Debye'a wynikającą z niskiej gęstości plazmy. Studnia potencjału przyciąga w ten rejon dodatnie jony Ar^+ . Ich koncentracja w tym rejonie sięga 10^{11} cm^{-3} , jednakże koncentracja elektronów jest niemal dwukrotnie większa. Warto zauważyć efekt polaryzacji rozkładu ładunków: maksimum rozkładu Ar^+ jest znacznie bliżej otworu ekstrakcyjnego niż maksimum rozkładu elektronów.



Rys. 14. Rozkłady potencjału i całkowitej gęstości ładunku w pobliżu otworu ekstrakcyjnego (rys. 7. z [H26]).

- Rozkład potencjału wskazuje na istnienie wklęsłego menisku plazmy. Rozkład ładunku przedstawiony na rys 8 z [H26] przedstawia z kolei wiązkę nieznacznie rozbieżną. mamy więc do czynienia z sytuacją, gdy

wiązka początkowo zbieżna, generowana przez wklęsły menisk osiąga minimalną szerokość (ang. *waist*) w pewnej odległości od źródła, a następnie na skutek konfiguracji pola elektrod i własnego ładunku przestrzennego staje się wiązką rozbieżną. Możliwość takiej ewolucji wiązki została potwierdzona przez inne modele numeryczne [86-88].

Prawo Childa-Langmuira opisujące zależność gęstości prądu od napięcia w przypadku jednowymiarowego przepływu ograniczonego rozkładem ładunku wyprowadzone zostało na początku zeszłego stulecia [89,90]. Z biegiem lat wprowadzono poprawki uwzględniające m.in. początkową prędkość cząsteczek [91,92], różne geometrie elektrod [93]. Mimo upływu lat zagadnienie przepływu prądu ograniczanego ładunkiem przestrzennym przyciągało i nadal przyciąga uwagę naukowców pracujących w różnych dziedzinach. Wspomnę jedynie, że powstały uogólnienia prawa Childa-Langmuira dla diod dwu i trójwymiarowych [94,95], opis wykorzystujący formalizm relatywistyczny [96], oraz kwantowy [97-100], uwzględniający efekty takie jak tunelowanie elektronów, w sytuacji gdy szerokość szczeliny jest rzędu nanometrów, co zaowocowało skalowaniem gęstości prądu typu $U^{1/2}$ i d^4 . Powstają kolejne uogólnienia praw opisujących przepływy ładunku między elektrodami, np. dla naprzemiennej ekstrakcji jonów dodatnich i ujemnych [101] czy też biorące pod uwagę zjawiska takie jak zderzenia w warstwie podwójnej emitującej jony [102,103]. Badane były i są też przepływy w mediach innych niż próżnia [104,105], poczynając od klasycznych badań Motta i Gurneya [106], od których nazwisk pochodzi nazwa prawa opisującego przepływ ładunku w ciele stałym.

Zależności $I(U)$ w przypadku ekstrakcji wiązki jonowej z plazmowego źródła jonów przyciągnęły też uwagę moją i zespołu w którym pracuję. Jedną z przyczyn była chęć wyjaśnienia przyczyn znacznych niekiedy rozbieżności mierzonych przez nas krzywych prądowo-napięciowych od skalowania $U^{3/2}$ (jak choćby krzywe prezentowane w omawianej poprzednio pracy [H26]). Kwestia „uniwersalności” prawa Childa-Langmuira jest niekiedy przyczyną zdumiewających nieporozumień, gdyż skalowanie typu $I \sim U^{3/2}$ wydaje się niektórym być na tyle „dogmatyczne”, że zetknąłem się nawet z opinią, że przyczyną odmiennych przebiegów może być wszystkim metodyka eksperymentu (a nie dajmy na to złożoność procesu ekstrakcji wiązki jonowej z rzeczywistego źródła jonów, w tym proces tworzenia się emitującego wiązkę menisku plazmy). Zagadnieniom tym poświęcone zostały prace [H17,H23].

Ogólna postać prawa Childa-Langmuira tj. zależność typu $j \sim U^{3/2}$ jest niezależna od kształtu elektrod, aczkolwiek wzory opisujące współczynnik perweancji np. dla elektrod sferycznych czy cylindrycznych [93] są nieco bardziej skomplikowane niż we wspomnianym wyżej przypadku elektrod płaskich. Należy jednak pamiętać, że wzór ten wyprowadzony został przy założeniu, że rozkład potencjału w całości determinowany jest przez ładunek przestrzenny. Równie istotnym założeniem dotyczy niezmiennego kształtu elektrod, zwłaszcza tej emitującej, co w przypadku plazmowych źródeł jonów nie jest prawdą [107], jako że kształt i wielkość menisku ewoluje wraz z napięciem ekstrakcyjnym i innymi parametrami pracy źródła. Kolejną przyczyną odchylenia charakterystyk $I(U)$ od prawa Childa-Langmuira jest fakt, że w wielu przypadkach przepływ ładunku elektrycznego podlega raczej ograniczeniu przez wydajność emisji z plazmy, a nie przez ładunek rozkład przestrzenny. Mając to na uwadze, należy traktować wzór Childa-Langmuira jako przypadek graniczny, gdy emisja z plazmy jest na tyle wydajna, by zasadniczym ograniczeniem stał wpływ ładunku przestrzennego - patrz np. rys. 4. i 6. w [108] czy rys. 14. w [21]. Innymi słowy: można przyjąć, że w rzeczywistym plazmowym źródle jonów spełnione są zawsze dwa warunki opisujące gęstość prądu ekstrahowanych jonów.

- 1) ograniczenie wynikające z prawa Childa-Langmuira
- 2) ograniczenie wynikające z wydajności emisji tj. opisywane przez wzór

$$j = 0.4 n_e e \sqrt{\frac{2kT_e}{m}} . \quad (12)$$

Oprócz tego mamy też do czynienia ze wspomnianą wyżej ewolucją kształtu i wielkości menisku z U .

Mamy zatem (porównaj wzór (3.75) w [93])

$$I = P(U, d, \dots) U^{3/2} , \quad (13)$$

przy czym współczynnik proporcjonalności (perweancja) zależy od szeregu czynników, z których najważniejszymi są: napięcie ekstrakcyjne i geometria układu elektrod. Złożoność zależności perweancji od mnóstwa czynników opisujących badany układ plazma/elektrody/wiązka została jeszcze dobitniej wyrażona przez wzór (9) w pracy [H23], przy czym geometria układu jest wyjaśniona na rys. 2. w tejże pracy. Aby dokładniej przyjrzeć się przebiegom krzywych $I-U$ i prześledzić zmiany perweancji spowodowane wzrostem napięcia ekstrakcyjnego zmierzono krzywe prądowo-napięciowe jonów Ar^+ używając źródła jonów typu Sideniusa i identycznego jak poprzednio zestawu eksperymentalnego (zilustrowanego na rys. 1 w [H23]).

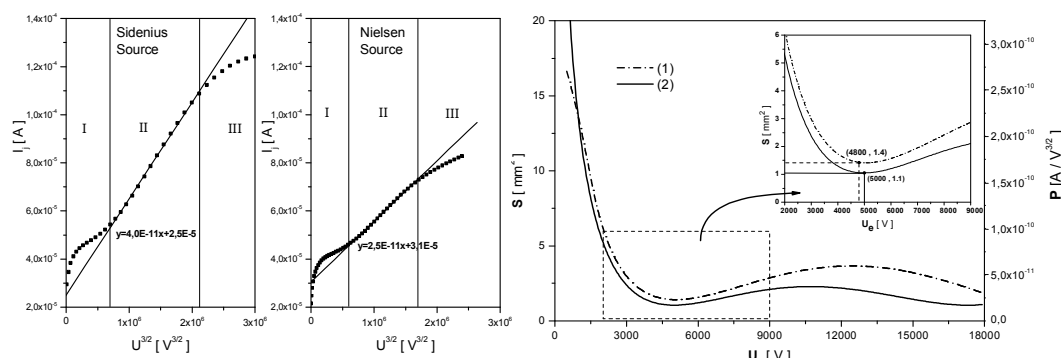
Wyniki badań można podsumować następująco:

- Krzywe $U-I$ (rys 3 w [H23]) niezależnie od napięcia wyładowania mają zbliżony kształt, z charakterystycznym punktem przegięcia dla U w zakresie 5-9 kV.
- Znacznie wygodniej analizować przebiegi tych krzywych we współrzędnych $(U^{3/2}, I)$. Z ekstrakcją ograniczaną przez ładunek przestrzenny (odcinek prosty, rejon II na rys. 15.) mamy do czynienia jedynie dla pewnego zakresu napięć ekstrakcyjnych. Powyżej około 20 kV obserwujemy wysycenie krzywej, ekstrakcja ograniczana jest przez emisję z plazmy. Widać także istotne odchyłki od prawa Childa-Langmuira w obszarze I - są one najprawdopodobniej skutkiem zmian kształtu i powierzchni menisku plazmy wraz z U .
- Analiza wykresu na rysunku 15. skłoniła mnie do wniosku, że **w przypadku krzywych $I(U)$ znacznie odbiegających od skalowania przewidywanego przez prawo Childa Langmuira** (jak np. rozpatrywane w [H23]) **właściwsze byłoby posługiwanie się nie tyle perweancją, co analogonem oporu dynamicznego, perweancją dynamiczną**, zdefiniowaną jako

$$P = \frac{dI}{dU^{3/2}} \quad (14)$$

Tak zdefiniowana perweancja dynamiczna pozostaje stała, jeśli odcinek charakterystyki prądowo-napięciowej we współrzędnych $(U^{3/2}, I)$ jest prostą. Warto zauważyć, że klasycznie zdefiniowana perweancja w przypadku odcinka w rejonie II rozpatrywanej charakterystyki malałaby, mimo iż ewidentnie przepływ prądu jest zgodny z prawem Childa-Langmuira.

- Wykres na rys. 15. potwierdza, że w obszarze II perweancja dynamiczna jest niemal stała, na poziomie $4 \cdot 10^{-11} \text{ A/V}^{3/2}$ (dla źródła Sideniusa). Korzystając z wzorów (10) i (14), zaproponowałem obliczenie efektywnej powierzchni elektrody. Należy jednak zachować daleko idącą ostrożność w interpretowaniu tej powierzchni jako powierzchni rzeczywistego menisku plazmy, aczkolwiek zmniejszanie się perweancji w obszarze I może być skutkiem zmniejszania się powierzchni wypukłego menisku plazmy, która wydyfundowała przez otwór ekstrakcyjny w warunkach niewielkiego napięcia ekstrakcyjnego. Wielkość S można interpretować jako ekwiwalentną powierzchnię elektrody (powierzchnię efektywną) w zastępczym układzie złożonym z elektrod płaskich.



Rys. 15. Krzywe prądowo-napięciowe we współrzędnych $(U^{3/2}, I)$ oraz perweancja/powierzchnia elektrody w funkcji napięcia ekstrakcyjnego. Wyniki dla Ar^+ , źródła jonów typu Sideniusa i Nielsena

Wykorzystując wprowadzone pojęcie powierzchni efektywnej zaproponowałem nową metodę szacowania temperatury jonowej plazmy źródła jonów, bazującą na:

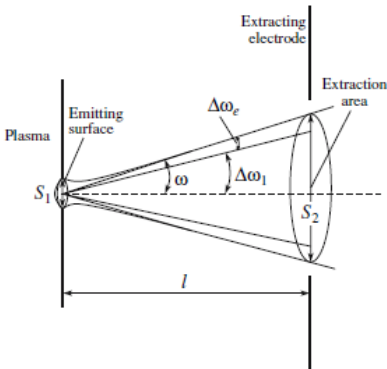
- pomiarach charakterystyk prądowo-napięciowych,
- modelowaniu biegu wiązki uwzględniającym geometrię układu źródło -elektroda ekstrakcyjna oraz oddziaływanie ładunku przestrzennego.

Poniżej przedstawiam krótki opis tej metody. W rozpatrywanym przypadku mamy do czynienia z sytuacją, gdy wraz z napięciem ekstrakcyjnym zmienia się zarówno powierzchnia menisku, jak i obraz otworu ekstrakcyjnego w płaszczyźnie elektrody ekstrakcyjnej. Przyczyn zmian szerokości wiązki jonowej jest kilka:

- niejednorodność pola elektrycznego wynikająca z geometrii układu,
- ładunek przestrzenny wiązki jonowej
- kształt menisku plazmy emitującego wiązkę jonową
- wpływ składowych poprzecznych prędkości początkowych jonów, zależnych od temperatury plazmy.

Aby zbadać wpływ trzech pierwszych czynników przeprowadziłem modelowanie biegu wiązki wykorzystując metodę Particle-In-Cell i poprzednio omówiony program numeryczny. Zakładałem, że temperatura jonowa plazmy jest zerowa ($T_i=0$), co przekłada się na brak składowych poprzecznych (do osi układu) prędkości początkowej. Cząstki były emitowane z wycinka sfery, której krzywiznę można było zmieniać (co imitowało ewolucję menisku) zaś pozostała geometria układu eksperymentalnego została wiernie odtworzona, utrzymywałem natężenie prądu wiązki $I=47 \mu A$ dla źródła Sideniusa i $I=42 \mu A$ dla źródła Nielsena. Zmieniając krzywiznę menisku badałem zmiany powierzchni przekroju wiązki (a zatem obrazu powierzchni emitującej) płaszczyzną czołową elektrody ekstrakcyjnej. Ustaliłem, że powierzchnia minimalna osiągana jest dla menisku wklęsłego o krzywiznie 4 mm (źródło Sideniusa). Promień wiązki w tym przypadku to $r=0.305$ mm, co odpowiada rozbieżności wiązki $\Delta\omega_1=0.63^\circ$ (przypadek $T_i=0$).

Używając oszacowanej uprzednio minimalnej powierzchni efektywnej do oszacowania kąta całkowitej rozbieżności wiązki uzyskałem $\omega=1.42^\circ$.



Rys. 16. Geometria rozpatrywanej wiązki. Kąt całkowitej rozbieżności względem osi układu oznaczony jako ω . Kąt rozbieżności obliczonej dla $T_i=0$ oznaczony jako $\Delta\omega_1$.

Przyczynę do całkowitej rozbieżności wiązki wynikający z istnienia składowych poprzecznych prędkości początkowych związanych z ruchem cieplnym jonów można zatem oszacować jako

$$\Delta\omega_T = \omega - \Delta\omega_1 \quad (15)$$

W rozpatrywanym przypadku zachodzi $\Delta\omega_T=0.79^\circ$. Mając na uwadze, że :

$$\text{tg}(\Delta\omega_T) = \sqrt{\frac{kT_i}{eU_{ext}}} \quad (16)$$

oszacowałem $\text{tg}(\Delta\omega_T)=0.0137$, co odpowiada temperaturze $T_i=0.91$ eV dla źródła Sideniusa. Postępując w identyczny sposób oszacowałem temperaturę plazmy w źródle typu Nielsena na $T_i=0.32$ eV.

Przedstawioną metodę cechuje pewne podobieństwo do sposobu szacowania temperatury za pomocą pomiarów emitancji wiązki, gdyż dla minimalnej wartości emitancji zachodzi:

$$\varepsilon_{\min} = \sqrt{\frac{kT}{m}} \frac{r}{2c} \quad (17)$$

Powyższy wzór, w którym c oznacza prędkość światła, jest słuszny dla kołowego otworu ekstrakcyjnego o promieniu r , podobny związek można wyprowadzić dla szczeliny [21].

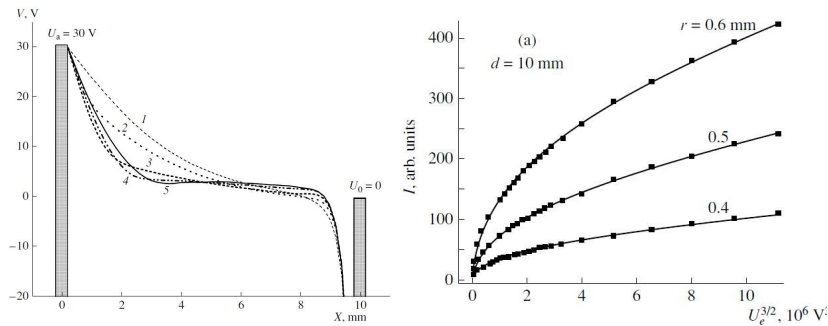
Należy mieć jednak na uwadze, że zaletą zaproponowanej metody jest jej prostota, gdyż pomiary emitancji wiązki jonowej są dużo bardziej złożone [109] niż wyznaczenie charakterystyki prądowo-napięciowej.

Kolejnym etapem moich badań było opracowanie numerycznego modelu ekstrakcji wiązki jonów z plazmowego źródła jonów i sprawdzenie jak wraz ze zmianą napięcia ekstrakcyjnego ewoluuje kształt i pole powierzchni menisku plazmy oraz perweancja dynamiczna. Podobnie jak w przypadku pracy [H26] wykorzystałem w tym celu zmodyfikowany program numeryczny opracowany początkowo z myślą o badaniu ekstrakcji jonów ujemnych z wielootworowych źródeł jonów. Wyniki przedstawiłem w pracach [H17, A40]. Modelowałem ekstrakcję jonów ze źródła plazmowego z katodą wnątkową. Schemat uproszczonego modelu takiego źródła pokazany jest na rys. 1 w [H17].

Sześcienna komora plazmowa ma bok o długości 1 cm. W jej przedniej ścianie znajduje się okrągły otwór ekstrakcyjny o promieniu r (zazwyczaj 0.5 mm). Tylne ścianki reprezentuje anodę o potencjale $U_a=30$ V. Pozostałe ścianki znajdują się na potencjale zerowym. Płaska elektroda ekstrakcyjna o potencjale $-U_e$ znajduje się w odległości d od ścianki z otworem ekstrakcyjnym. Neutralna plazma wypełniająca komorę źródła składa się z elektronów oraz jonów $^{40}\text{Ar}^+$. Użyłem $2 \cdot 10^7$ makro-cząstek. Do obliczania rozkładu ładunku wykorzystałem najprostszą i najszybszą odmianę metody PIC, w której cały ładunek makro-cząstki przypisany jest do jednego węzła siatki. O ile nie zaznaczono inaczej, początkowe wartości prędkości cząstek odpowiadają temperaturze $T=1$ eV. Początkowe kierunki prędkości wybierane są losowo z rozkładem jednorodnym. Krok czasowy to $\Delta t=5 \cdot 10^{-11}$ s.

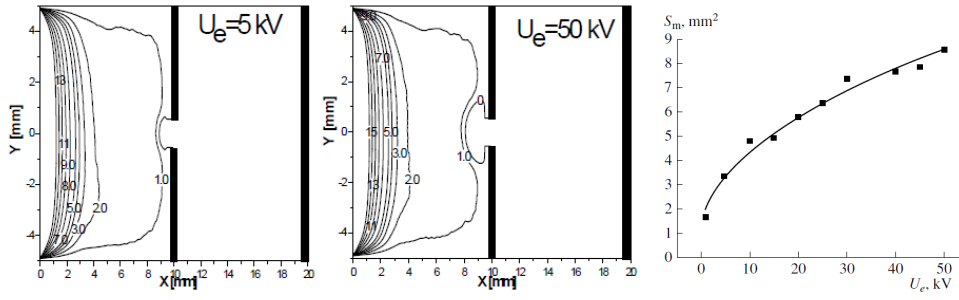
Najważniejsze wyniki zaprezentowane w omawianej pracy:

- Modelowany układ osiąga stan kwazistacjonarny po kilkuset iteracjach (800 w przypadku $U_e=10$ kV, co widać na rys 2. w [H17]), później obserwowane są oscylacje potencjału plazmy o amplitudzie poniżej 1 V. Wewnątrz komory plazmowej ustala się niemal płaski rozkład potencjału świadczący o ekranującym działaniu plazmy. Jak należało się spodziewać, pole elektryczne znika wewnątrz plazmy, co widać na rysunku 17.



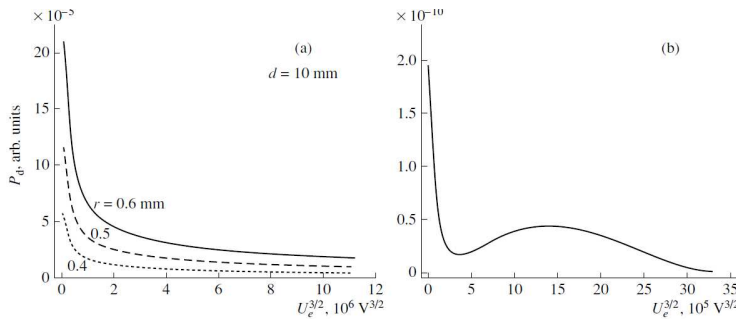
Rys. 17. Profile potencjału wzdłuż osi źródła zapisane co 175 iteracji dla $U_e=10$ kV (po lewej). Krzywe prądowo-napięciowe otrzymane w symulacjach dla różnych r . (po prawej).

- Natężenia ekstrahowanych prądów jonowych rosną szybko z U_e a ich wartość ustala się po kilkuset (~ 500) iteracjach, co widać na rys. 4. w [H17]. Uśrednione wartości prądu posłużyły do wykreślenia krzywych prądowo-napięciowych, które prezentowane są na rys. 17. Krzywe te mają postać $I \sim U_e^{3/4}$, odmienne od przebiegów przewidywanych przez prawo Childa-Langmuira, a więc mamy tu do czynienia z ekstrakcją wiązki ograniczaną przez emisję z plazmy. Skalowanie $I \sim U_e^{3/4}$ zachodzi dla różnych promieni otworu ekstrakcyjnego.
- Rozmiar menisku plazmy rośnie wraz z napięciem ekstrakcyjnym, zgodnie z wcześniej omawianą interpretacją wpływu U_e , co widać na rys. 18. Przyjmując że menisk jest ograniczany przez powierzchnię $V(x,y,z)=0$ wykreśliłem zależność jego pola powierzchni od napięcia ekstrakcyjnego (rys. 18.). Zależność tą można dość dobrze dopasować krzywą typu $y=a+bx^{0.5}$, w omawianym przypadku $a=0.89$ mm, co stosunkowo dobrze odpowiada powierzchni otworu ekstrakcyjnego.



Rys. 18. Rozkłady potencjału wewnątrz komory źródła jonów (po lewej i w środku) dla różnych wartości U_e (rys. 10 z [H17]), oraz zależność pola powierzchni menisku plazmy od U_e (po prawej, rys 11. z [H17]).

- Wraz z powiększaniem się powierzchni menisku rośnie też jego odległość od elektrody ekstrakcyjnej, co zilustrowane jest na rysunku 6. z [H17]. Przyczynę do rzeczywistej odległości menisku od elektrody ekstrakcyjnej sięga nawet 15 % odległości domniemanej d , czyli odległości elektroda ekstrakcyjna - krawędź otworu ekstrakcyjnego. Odsuwanie się menisku pod wpływem silnego pola ekstrakcyjnego jest jedną z możliwych przyczyn odchyleń (patrz rys. 7 w [H17]) od skalowania $I \sim d^{-2}$ przewidywanego przez model elektrod o stałym kształcie, z którego wynika prawo Childa-Langmuira.
- Natężenie ekstrahowanej wiązki rośnie z temperaturą plazmy, co widać na rysunku 7. w [H17], przy czym efekt ten jest wyraźniejszy dla mniejszych napięć ekstrakcyjnych, zgodnie z [92,110]. Wzrost prądu wraz z temperaturą jest nieco wolniejszy (patrz rysunek 8 z [H17]) niż przewiduje to skalowanie $j \sim \sqrt{T_e}$, co może mieć związek z dynamiką kształtu menisku.
- Wykorzystując wprowadzone wcześniej pojęcie perweancji dynamicznej pokazałem, że zmienia się ona w przypadku danych uzyskanych z modelu numerycznego jak $U_e^{-3/4}$, zmieniając się bardzo wolno dla napięć ekstrakcyjnych powyżej 5 kV. Przebieg $P_d(U_e)$ uzyskany przy pomocy modelu numerycznego jest bardzo podobny do zachowania krzywych zmierzonych eksperymentalnie, co widać na rys. 19.



Rys. 19. Perweancja dynamiczna jako funkcja U_e . Porównanie wyników obliczeń numerycznych (a) i pomiarów (b) (rys. 12. [H17]).

Wprowadzając pojęcie powierzchni efektywnej (ekwiwalentnej):

$$S_e = cP_d, \quad (18)$$

gdzie $c = (9/4\epsilon_o)\sqrt{m/2qd^2}$, można przyjąć, że **prawo Childa-Langmuira dla zastępczego układu o elektrodach płaskich o powierzchni S_e w postaci lokalnej (dla przyrostów) jest zachowane w każdym punkcie charakterystyki prądowo-napięciowej.**

C. Modelowanie źródeł jonowych z gorącą wnęką

Źródła jonów z gorącą wnęką wykorzystywane są od ponad czterdziestu lat, pierwotnie przede wszystkim w poszukiwaniach nowych izotopów [111-114]. Ich liczne zalety, do których zaliczyć należy przede wszystkim:

- wysoką wydajność, a co za tym idzie niewielkie wymagania co do ilości substancji roboczej (próbki, która ma zostać zjonizowana)

- doskonałą jakość wiązki jonowej (jej czystość i niewielki rozrzut energetyczny)
- niezawodna konstrukcja,

sprawiają, że źródła tego typu (często wykorzystujące jonizację laserową) wciąż przyciągają uwagę naukowców zaangażowanych w projekty typu ISOL (Isotope Separation On-Line) [115-125], w ramach których realizowane są badania z zakresu m.in. spektroskopii jądrowej, elektromagnetycznej separacji izotopów czy astrofizyki. Zasadniczą częścią źródła jonów pozostaje jonizator wykonany z materiału trudnotopliwego (W, Ta itp.) zazwyczaj w postaci półotwartej rurki, aczkolwiek spotykane są jonizatory o kształcie zbliżonym do wycinka sfery [126,127]. Jonizator ogrzewany jest do wysokiej temperatury roboczej (~2000 K i więcej) z wykorzystaniem np. grzania omowego i intensywnych wiązek elektronów o energii rzędu 1 keV. Atomy dostające się do jonizatora mogą ulegać jonizacji powierzchniowej podczas wielokrotnych zderzeń z gorącymi ściankami wnęki. Źródło jonów może pracować zarówno w trybie off-line, kiedy to jonizowana substancja wytwarzana jest przed rozpoczęciem jonizacji i separacji masowej, jak i w trybie on-line, gdy wszystkie te procesy zachodzą jednocześnie. Rozwiązanie takie jest szczególnie pożądane w przypadku izotopów o bardzo krótkim okresie półrozpadu. W takim przypadku naświetlana tarcza znajduje się albo w bezpośrednim sąsiedztwie jonizatora i jest z nim połączona transferem [128,129], bądź też odpowiednio dobrany jonizator jest jednocześnie naświetlaną tarczą, a wytwarzane w nim izotopy uwalniane są bezpośrednio do wnęki [130,131].

W rozpatrywanym źródle zachodzi szereg procesów fizycznych mogących mieć istotny wpływ na uzyskiwanie wiązek jonowych. Do najważniejszych z nich zaliczyć należy:

- 1) reakcje jądrowe w tarczy wywołane jej naświetleniem protonami bądź ciężkimi jonami,
- 2) dyfuzja wytworzonych nuklidów w obrębie tarczy,
- 3) efuzja w obrębie jonizatora (a także transferu, jeśli taki występuje),
- 4) jonizacja powierzchniowa na gorących ściankach wnęki, uważana za zasadniczy mechanizm jonizacji,
- 5) dodatkowe mechanizmy jonizacji (jonizacja przez zderzenie z elektronami np. przyspieszonymi w polu ekstrakcyjnym, elektronami wtórnymi bądź jonizacja wywołana przez promieniowanie),
- 6) rozpad promieniotwórczy nuklidów,
- 7) straty jonów wywołane zderzeniami ze ściankami oraz innymi cząsteczkami,
- 8) przyspieszanie jonów przez pole elektrostatyczne elektrody układu ekstrakcyjnego i formowanie wiązki.

Jednym z fundamentów modelowania jest odpowiednia selekcja procesów fizycznych, które zostaną uwzględnione w modelu. Z jednej strony model powinien ograniczać się do tych aspektów rzeczywistości, które mają istotny związek ze zjawiskami, które model ma możliwie wiernie opisywać. Taka selekcja pozwala zazwyczaj na znaczne zredukowanie rozmiaru zadania obliczeniowego. Z drugiej strony, wybór musi być na tyle szeroki, by nie prowadzić do nadmiernych uproszczeń w opisie modelowanego zjawiska, co może prowadzić do błędnych rezultatów.

Powstało wiele modeli analitycznych opisujących niektóre zjawiska fizyczne zachodzące w źródłach jonów z gorącą wnęką, dość obszerny przegląd literatury na ten temat znaleźć można we wstępnej części pracy [H1]. Z drugiej strony, mimo swej złożoności, zjawiska transportu nuklidów między tarczą a jonizatorem [132], czy też samego procesu jonizacji w wielokrotnych zderzeniach atomów ze ściankami, a później uwalniania wytworzonej wiązki jonowej [133,134] modelowane było stosunkowo rzadko. W szczególności numerycznego opisu nie doczekał się, wedle mojej wiedzy, typ źródła z gorącą wnęką, która stanowi jednocześnie naświetlaną tarczę, w której wytwarzane są pożądane izotopy. Jednym z celów moich badań było wypełnienie tej luki i opracowanie możliwie wiarygodnego modelu numerycznego zjawisk zachodzących w źródłach z gorącą wnęką. Wyniki dostarczane przez model numeryczny mogą być niezwykle użytecznym narzędziem w interpretowaniu danych uzyskanych na drodze eksperymentów z dziedziny np. spektroskopii jądrowej. Modelowane przeze mnie źródła jonów mogą być także wykorzystywane dla potrzeb implantacji jonowej, a sam model można zmodyfikować tak, by mógł opisywać źródła termoemisyjne stosowane np. spektrometrii masowej.

Poniżej podaję zwięzły **opis modelu** i wykorzystującego go programu numerycznego.

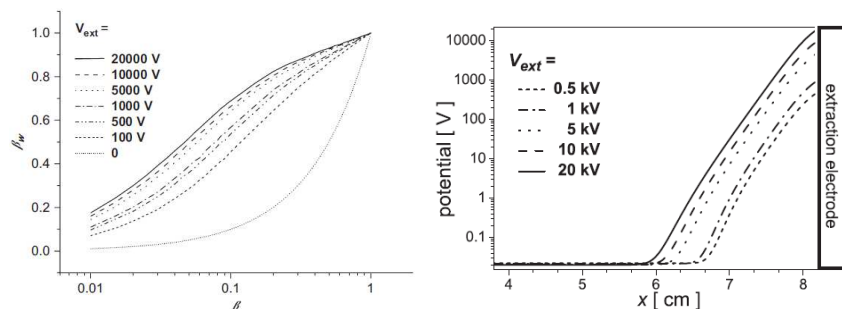
Najwcześniejsza stworzona przeze mnie wersja modelu i programu numerycznego, wykorzystana w badaniach zaprezentowanych w [H19] uwzględniała przede wszystkim procesy wymienione w punktach 3, 4, 7 (straty spowodowane zderzeniami z przeszkodami) oraz 8. Model ten można zatem uważać za adekwatny jedynie dla izotopów stabilnych, bądź charakteryzujących się bardzo długimi czasami półrozpadu (wielokrotnie dłuższymi niż średni czas przebywania atomu w źródle jonów).

Założyłem cylindryczny kształt jonizatora o długości zmieniającej się od kilku mm do kilkunastu centymetrów. Zastosowałem dość uproszczoną geometrię układu ekstrakcyjnego (pojedyncza, płaska elektroda o potencjale $-V_{ext}$), jako że zasadniczym celem tamtych badań nie było formowanie wiązki jonowej, a zmiany wydajności źródła związane z geometrią jonizatora i napięciem ekstrakcyjnym. Modelowane było źródło jonów działające w trybie on-line, a zatem mając na uwadze procesy wspomniane w punktach 1 i 2 założyłem, że początkowe położenia śledzonych cząsteczek rozłożone są równomiernie na całej wewnętrznej powierzchni jonizatora. Efuzję modelowałem w następujący sposób: prędkość początkowa cząstki związana była założoną temperaturą jonizatora (rzędu 0.2 - 0.3 eV), zaś kierunek ruchu determinowany był przez tzw. prawo Knudsena [135] tj. założyłem kosinusoidalny (względnej prostej normalnej do powierzchni) rozkład prawdopodobieństwa emisji cząsteczki z powierzchni wnęki. Jonizacja powierzchniowa mogła zachodzić w każdym zderzeniu cząstki neutralnej z gorącą powierzchnią z prawdopodobieństwem β (związanym ze stopniem jonizacji α określanym przez prawo Sahy-Langmuira). Trajektorie cząstek (zarówno jonów jak i neutralów) wyznaczone były przez numeryczne całkowanie klasycznych (ze względu na stosunkowo niewielkie energie cząsteczek) równań ruchu. Rozkład potencjału znajdowany był przez rozwiązywanie równania Laplace'a iteracyjną metodą kolejnych nadrelaksacji SOR [38], z uwzględnieniem warunków brzegowych określanych przez kształt i potencjały elektrod. Natężenia pola elektrycznego wyznaczałem stosując numeryczne różniczkowanie otrzymanego uprzednio rozkładu potencjału, możliwe jest także np. ustanowienie jednorodnego pola elektrostatycznego w obrębie całej wnęki. Program numeryczny śledzi trajektorie i stan cząstek dopóki nie miną one otworu ekstrakcyjnego, wyznaczając całkowitą wydajność jonizacji w źródle jonów β_s (niekiedy oznaczaną jako β_w), zdefiniowaną przeze mnie jako stosunek liczby ekstrahowanych pożądanych jonów do liczby wszystkich cząsteczek trafiających do jonizatora. Więcej szczegółowych informacji dotyczących modelu numerycznego (jak np. jego schemat blokowy) można znaleźć w pracach [H18, H19]. Nieco bardziej rozbudowany model jonizacji izotopów stabilnych wykorzystałem w trakcie przygotowywania pracy [H6]. Model ten jest wzbogacony m.in. o możliwość symulowania powstawania bariery potencjału w pobliżu gorącej ścianki, czy też o zliczanie zderzeń dla każdej z cząstek.

Najważniejszymi rezultatami zaprezentowanymi w [H19] są:

- zaobserwowanie bardzo szybkiego wzrostu wydajności jonizacji wraz ze wzrostem natężenia jednorodnego pola elektrycznego we wnętrzu jonizatora. Konfiguracja ta nie jest jedynie wyidealizowanym przypadkiem testowym, jej osiągnięcie jest możliwe do osiągnięcia w przypadku stosowania grzania omowego [136,137]. Wzrost wydajności wynika z faktu, że odpowiednio intensywne pole elektryczne usuwa niemal każdy powstały jon wkrótce po jego wytworzeniu, co ogranicza straty związane z neutralizacją na przeszkodach. Efekt ten został jeszcze dokładniej zilustrowany na rysunkach 2. oraz 3. w późniejszej pracy [H6].
- wykazanie zwiększania się wydajności jonizacji w cylindrycznej wnęce wraz z jej długością w przypadku jednorodnego pola elektrycznego we wnętrzu. Jest to konsekwencja rosnącej liczby zderzeń cząsteczek z gorącymi ściankami jonizatora.
- obserwacja szybkiego wzrostu wydajności jonizacji wraz z napięciem ekstrakcyjnym przyłożonym do pojedynczej elektrody ekstrakcyjnej. Już napięcia rzędu 1 kV pozwalają na osiąganie wydajności jonizacji znacznie przewyższających prawdopodobieństwo jonizacji przewidywane przez prawo Sahy-Langmuira. Wzrost wydajności jest w znacznym stopniu konsekwencją faktu, iż głębokość na jaką pole ekstrakcyjne wnika w głąb jonizatora wyraźnie rośnie z V_{ext} , co jest doskonale widoczne np. na rysunku 20. W konsekwencji w coraz większej objętości jonizatora ma miejsce reżim pracy określany w artykułach

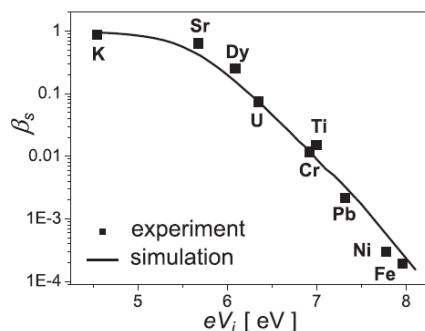
skrótowo terminem „każdy jon”/‘each ion’, polegający na tym, iż każdy wytworzony jon jest natychmiast ekstrahowany, co wyklucza straty związane z neutralizacją w kolejnych zderzeniach.



Rys. 20. Wydajność jonizacji w funkcji β dla różnych wartości V_{ext} (po lewej, rys. 3. z [H19]). Rozkład potencjału wzdłuż osi jonizatora dla różnych wartości V_{ext} (po prawej, rys. 5. z [H6])

Najważniejszymi rezultatami zaprezentowanymi w późniejszej pracy [H6] są:

- wykazanie, że w przypadku stosowania klasycznego układu ekstrakcyjnego (np. z pojedynczą elektrodą) wydajność jonizacji nuklidów stabilnych niemal nie zależy od długości jonizatora (rys. 8 z pracy [H6]). Wynika to ze wspomnianego wcześniej faktu, że wydajność jonizacji zależy raczej od głębokości wnikania pola,
- potwierdzenie na drodze modelowania numerycznego efektu zwiększania się wydajności jonizacji na skutek istnienia bariery potencjału w pobliżu gorącej ścianki (rys. 9. w pracy [H6]). Formowanie się takiej bariery przewidywane było m.in. w pracy [138] jako efekt formowania się tzw. plazmy izotermalnej w gorącej wnęce. Istnienie bariery rzędu 0.5 eV skutkuje wzrostem wydajności jonizacji o ~30 %,
- **odtworzenie zależności wydajności jonizacji od potencjału jonizacji substancji wprowadzonej do jonizatora.** Uzyskałem bardzo dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi przedstawionymi w [139],



Rys. 21. Zależność wydajności jonizacji od potencjału jonizacji substancji. Porównanie danych eksperymentalnych i przewidywań modelu numerycznego (rys. 10. z [H6]).

- **odtworzenie zależności wydajności jonizacji od temperatury wnęki.** Zależność prawdopodobieństwa jonizacji od temperatury jest w znacznym stopniu konsekwencją postaci wzoru Sahy-Langmuira, w którym temperatura występuje w członie eksponencjalnym. **Uzyskałem dobrą jakościową zgodność z danymi eksperymentalnymi prezentowanymi w pracy [138]**
- uzyskanie charakterystyk prądowo-napięciowych źródła z gorącą wnęką, jakościowo zgodnych z charakterystykami uzyskanymi w eksperymencie [140].

Wspomniane wyżej rezultaty świadczą o wiarygodności opracowanego przeze mnie modelu i jego zdolności do modelowania zjawisk fizycznych związanych z działaniem źródła jonów z gorącą wnęką.

Omawiana praca zawiera również porównanie wyników symulacji z przewidywaniami niektórych modeli analitycznych opisujących jonizację w gorącej wnękce. Jestem współautorem dwu z pośród tych modeli (tzw. model „każdy jon” oraz model jonizatora sferycznego). Modele te zostały zaprezentowane w pracy [H22]. Modele te bazują na założeniu, że efuzję wszystkich cząstek trafiających do jonizatora można rozbić na skończoną liczbę (z) etapów, w ogólności zależną od geometrii wnęki i średniej drogi między zderzeniami ze ściankami wnęki. Wykazane zostało, że droga ta jest równa promieniowi cylindra wnęki, (wzór (7) w pracy [H22]). Pierwszy ze wspomnianych modeli ('each ion') przyjmuje, że każdy wytworzony na i -tym etapie jon

opuszcza wnękę, natomiast prawdopodobieństwo opuszczenia jonizatora przez atom obojętny dane jest przez czynnik zależny od jego geometrii: $k_i = r^2 / (l - ir)^2$. Sumując liczbę wszystkich ekstrahowanych jonów i dzieląc ją przez liczbę wszystkich cząstek umieszczonych we wnęcie uzyskuje się poniższy wzór ((9) z pracy [H22]) :

$$\beta_s = \beta \{ 1 + (1 - \beta)(1 - k_0) + \dots + (1 - \beta)^{z-1} (1 - k_0) \dots (1 - k_{z-1}) \}. \quad (19)$$

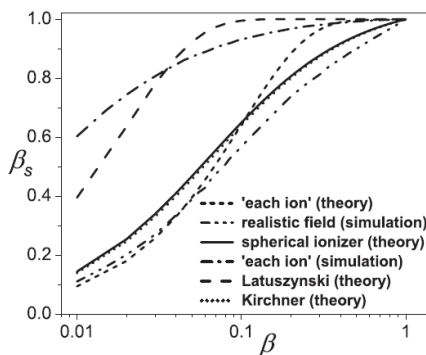
Dane zaprezentowane na rysunku 6. pracy [H22] potwierdzają, że jonizator pracujący w takim reżimie osiąga wydajności wielokrotnie przekraczające oszacowania wzoru Sahy-Langmuira, aczkolwiek wymaga dość natężeń pola elektrycznego (rzędu 0.5 kV/cm).

Kolejny, zaproponowany przeze mnie model analityczny zakłada, że jonizator można przybliżyć sferyczną wnęką z niewielkim otworem. Przyjmując z równe stosunkowi powierzchni wewnętrznej wnęki i otworu ekstrakcyjnego i postępując identycznie jak w poprzednim przypadku (zakładając, że prawdopodobieństwo opuszczenia wnęki przez atom to $k=1/z$) otrzymałem po licznych przekształceniach poniższy wynik:

$$\beta_s = \beta \frac{1}{1 - (1 - k)(1 - \beta)}. \quad (20)$$

Jak łatwo zauważyć analizując postać tego wzoru, model jonizatora sferycznego również przewiduje wydajności jonizacji dużo wyższe niż oszacowania wzoru Sahy-Langmuira. Zaletą opisanych powyżej modeli jest ich prostota i elegancja, gdyż wiążą wydajność jonizacji we wnęcie przede wszystkim z jej geometrią.

Wspomniane wcześniej porównanie przewidywań modeli analitycznych i numerycznych dla nuklidów stabilnych dane jest na rysunku 22. Przewidywania modelu 'each ion' bardzo dobrze pokrywają się z wynikami obliczeń numerycznych dla β mniejszych niż 0.05. Rozbieżności dla większych wartości mogą być efektem upraszczających założeń tego modelu dotyczących dryfu wszystkich cząstek neutralnych w kierunku otworu ekstrakcyjnego, podczas gdy model numeryczny opisuje raczej mniej lub bardziej przypadkowe błądzenie cząstek we wnęcie. Warto też zauważyć, że model analityczny 'each ion' przewiduje dobrze wyniki obliczeń numerycznych dla przypadku jednorodnego pola ekstrakcyjnego dla $\beta > 0.3$. Model jonizatora sferycznego przewiduje niemal identyczny przebieg krzywych $\beta_s(\beta)$ jak model numeryczny dla pojedynczej elektrody ekstrakcyjnej, pewne przeszacowanie wyników modelu analitycznego może być rezultatem upraszczających założeń dotyczących geometrii wnęki i efektywności ekstrakcji jonów. Godny szczególnej, moim zdaniem, uwagi jest fakt, że **przewidywania zaproponowanego przeze mnie modelu jonizatora sferycznego są w idealnej wręcz zgodności z krzywymi $\beta_s(\beta)$ opisywanymi przez wzór wyprowadzony w oparciu o nieco inne założenia przez R. Kirchnera [139], uznawanego za jeden z najwybitniejszych autorytetów m.in. w dziedzinie źródeł jonów z gorącą wnęką.**



Rys. 22. Krzywe $\beta_s(\beta)$ przewidywane przez modele analityczne omawiane w pracach [139], [140] oraz [H22] jak również przez omawiany model numeryczny.

Kolejnym zjawiskiem fizycznym które uwzględniłem w rozwijanym modelu jest jeden z dodatkowych mechanizmów jonizacji wspomnianych w punkcie 5, a konkretnie jonizacja przez zderzenia z elektronami. Założyłem, że ze względu na bardzo wysoką temperaturę ścianek wnęki termoeemisja elektronowa jest na tyle intensywna, że koncentracja elektronów (przyspieszanych przez pole ekstrakcyjne wnikające w głąb wnęki) o

energiach większych niż progowa energia jonizacji E_i rozpatrywanej substancji osiąga wartości na tyle duże, że przyczynek od tego mechanizmu produkcji jonów powinien być uwzględniony, zwłaszcza w przypadku substancji o niewielkim β . Bazujący na metodzie Monte Carlo model opisałem w pracy [H15]. Koncentracja elektronów zdolnych do jonizacji może być oszacowana wzorem:

$$n_e = \frac{2lj}{e r \bar{v}}, \quad (21)$$

gdzie j to gęstość prądu termoemisji, którą szacowałem z wzoru Richardсона-Dushmana, e - ładunek elementarny, r - promień wnęki, $\bar{v}$ - średnia prędkość przyspieszanych elektronów zaś l to odległość związana z głębokością wnikania pola elektrycznego do wnęki (maksymalna odległość od otworu ekstrakcyjnego, z której startujące elektrony są w stanie osiągnąć energie większą niż E_i).

Oznaczając przez σ średnią wartość przekroju czynnego na jonizację w zderzeniach z elektronami, oszacowałem średnią drogę swobodną atomu rozpatrywanej substancji ze względu na jonizację:

$$\lambda = \frac{1}{n_e \sigma}. \quad (22)$$

Dane zaprezentowane na rys 1. w pracy [H15] pokazują, że **dla dostatecznie dużych temperatur (rzędu 0.3 eV) λ może stać się porównywalna z typowymi rozmiarami jonizatora, a więc przyczynek od jonizacji elektronami może istotnie zmienić oszacowania wydajności jonizacji.** Rysunki 2. i 3. w tej samej pracy potwierdzają to przypuszczenie. Względny udział jonizacji przez zderzenia z elektronami może przekraczać wkład od jonizacji powierzchniowej dla kombinacji jonizator/jonizowana substancja opisanych niewielkim współczynnikiem β . W skrajnych przypadkach przyczynek od jonizacji elektronami może być nawet kilkukrotnie większy niż wkład od jonizacji powierzchniowej, co sprawia że uwzględnienie tego mechanizmu w modelu jest jak najbardziej celowe.

Możliwość zachodzenia jonizacji przez zderzenia z elektronami w wysokotemperaturowym źródle jonów została także wykazana na drodze eksperymentalnej [141]. W widmie masowym zaobserwowano m.in. jony podwójne i potrójne wolframu oraz jony Be^+ , których powstanie na drodze jonizacji powierzchniowej jest wykluczone ze względu na wysoki potencjał jonizacji. Autorzy wspomnianej pracy postulowali, że wymienione wyżej jony mogły powstać na skutek jonizacji przez zderzenia z elektronami pochodzącymi z termoemisji, przyspieszonymi dodatkowo przez pole ekstrakcyjne. **Opracowany przeze mnie model numeryczny potwierdza te przypuszczenia.** Wykorzystując eksperymentalne przekroje czynne [142] na powstawanie jonów pojedynczych i podwójnie naładowanych oszacowałem względne prawdopodobieństwa produkcji tych typów jonów dla Pb (0.158), Bi (0.115), Sn (0.111), P (0.043), S (0.042) oraz Cu (0.038) [H1].

Numeryczny model źródła jonów z gorącą wnęką w swej dotychczas omawianej postaci był adekwatny dla izotopów stabilnych. Aby uczynić go użytecznym dla potrzeb opisu jonizacji izotopów radioaktywnych zdecydowałem się zaimplementować proces rozpadu promieniotwórczego (wspomniany w punkcie 6) używając metody Monte Carlo. Opis użytego modelu, jak i uzyskane za jego pomocą wyniki umieściłem w pracach [H1,H4]. Założyłem, że jądro nuklidu pierwotnego ulega rozpadowi po czasie $t_{dec} = -\tau_{1/2} \ln RND$, gdzie $\tau_{1/2}$ to okres półrozpadu, a RND to liczba pseudolosowa z przedziału (0,1). Należy w tym miejscu zdać sobie sprawę, że na czas, jaki atom spędza w źródle jonów składa się nie tylko sumaryczny czas przelotu między ściankami (który dotychczas omawiany model jest w stanie obliczać), ale także czas, jaki atomy spędzają przylegając do ścianek wnęki (ang. *sticking time*) jak również czas, jaki upływa od wytworzenia nuklidu w naświetlanej tarczy do wydostania się do wnętrza wnęki. We wcześniejszej pracy [H4] uwzględniłem jedynie pierwszy i drugi z tych czynników, co może np. odpowiadać założeniu, że jonizowany preparat jest nałożony na powierzchnię wnęki. Należy zdawać sobie sprawę z faktu, że czas przylegania cząsteczki do powierzchni jest przypadkowy dla każdego aktu zdarzenia, przy czym średni czas przylegania silnie zależy od temperatury T i jest opisywany jest wzorem Frenkela [143]:

$$\tau_s = \tau_o \exp\left(\frac{\Delta H_a}{kT}\right), \quad (23)$$

gdzie ΔH_a to swobodna entalpia adsorpcji (półempiryczny model przewidujący wartość tej wielkości dla różnych kombinacji podłoże/cząstka można znaleźć w pracach [144,145]), zaś τ_o to odwrotność częstości Debye'a drgań sieci krystalicznej. Przykłady obliczeń czasu przylegania wedle modelu Eichlera można znaleźć w pracy [146], zaś doświadczalnie zmierzone wartości czasów przylegania w pracy [147]. Przyjąłem, że czas przylegania w konkretnym akcie zderzenia wiąże się ze średnim czasem przylegania wzorem:

$$t_{stick} = -\tau_s \ln RND. \quad (24)$$

Zakładając, że rozpatrywana jest jonizacja izotopów krótkożyciowych, a nuklidem pożądanym przez użytkownika aparatury jest nuklid pierwotnie wytworzony w trakcie naświetlania w tarczy, zdefiniowałem wzór opisujący wydajność jonizacji źródła w ten sposób, że w jego liczniku występują jedynie jony nuklidu pierwotnego (patrz np. wzór (3) pracy [H4]).

Najważniejszymi rezultatami zaprezentowanymi we wspomnianej pracy [H4] są:

- Otrzymanie zależności $\beta_s(\beta)$ dla przypadku $\tau_s=0$. Wydajność jonizacji drastycznie maleje gdy czas przebywania cząstki we wnętrzu staje się porównywalny (lub dłuższy) od okresu półrozpadu (rys 2.).
- Wykazanie wpływu długości średniego czasu przylegania na wydajność jonizacji izotopów krótkożyciowych. Podobnie jak w poprzednim przypadku, wydajność jonizacji wyraźnie maleje, gdy całkowity czas przebywania we wnętrzu staje się porównywalny z okresem półrozpadu. Jest to o tyle istotny czynnik, że nawet dla umiarkowanych długości czasów przylegania całkowity czas spędzany na powierzchni wnęki może wielokrotnie przewyższać średni czas lotu we wnętrzu (rys. 3.).
- Wykazanie, że w przypadku izotopów krótkożyciowych wydajność jonizacji maleje z długością jonizatora. Efekt ten jest tym silniejszy, im dłuższy jest czas przylegania do ścianek wnęki (rys. 4.). Wyniki obliczeń potwierdzają, że im krótszy okres połowicznego rozpadu, tym bardziej preferowany jest zwarty kształt jonizatora, ograniczający średni czas przebywania nuklidu we wnętrzu.

Dalsze badania z wykorzystaniem opisywanego modelu przedstawiłem w pracy [H1]. Do najważniejszych wyników można zaliczyć:

- Prześledzenie zależności wydajności jonizacji w cylindrycznej wnęcie w zależności od jej długości dla różnych przestrzennych rozkładów miejsca produkcji nuklidów krótkożyciowych. Spadek wydajności jest większy w przypadku produkcji nuklidów w głębi wnęki, co rodzi konieczność przebycia większego dystansu na drodze efuzji (rys 7. w [H1]) . Wspomniany problem jest tym bardziej palący, im dłuższy τ_s .
- Prześledzenie zmian kształtu krzywych prądowo-napięciowych uzyskanych dla nuklidów krótkożyciowych ze zmianą średniej długości czasu przylegania (rys. 6.).
- Obliczenia zmian wydajności jonizacji nuklidów krótkożyciowych wraz z temperaturą jonizatora. Model uwzględnia nie tylko zmiany średnich prędkości cząstek z T, prawdopodobieństwa jonizacji danego przez wzór Sahy-Langmuira ((4) w [H1]) , ale także zmiany średniego czasu przylegania według wzoru:

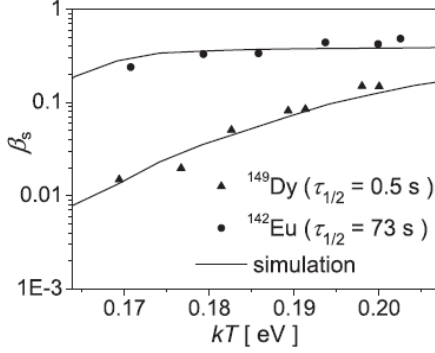
$$\tau(kT) = \tau(kT_o) \exp\left[\Delta H_a \left(\frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_o}\right)\right], \quad (25)$$

przy czym długości czasów przylegania dla $kT_o=0.233$ eV ustaliłem zgodnie z cytowaną wcześniej systematyką Eichlera. **Uzyskałem bardzo dobrą zgodność (rys.23.) z wynikami eksperymentalnymi uzyskanymi dla krótkożyciowych izotopów dysprozu i europu [90]. Traktując wartości entalpii adsorpcji jako parametr dopasowania określiłem ich wartości na 10 eV (Eu) oraz 4 eV (Dy).**

- Zaimplementowanie procesu dyfuzji nuklidów wytworzonych w jonizatorze na skutek naświetlania. Przyjąłem, że atomy nuklidu pierwotnego, które docierają do powierzchni jonizatora, wytwarzane są w cienkiej warstwie tarczy, dla której dystrybuantę rozkładu czasowego prawdopodobieństwa uwalniania nuklidu z powierzchni można przybliżyć wzorem (26) , który wykorzystywany był np. w pracy [149]:

$$F(t) = 1 - \frac{8}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2} \exp\left[-\frac{(2n+1)^2 t}{\tau_d}\right], \quad (26)$$

gdzie τ_d jest skalą czasową charakteryzującym proces dyfuzji (wzór (13) w pracy [H1]). Można zatem przyjąć, że atom dyfunduje na powierzchnię po czasie losowanym według wzoru $t_{diff} = F^{-1}(RND)$, gdzie F^{-1} jest funkcją odwrotną do dystrybucyjnej. Zmiany wydajności jonizacji nuklidów promieniotwórczych we wnętrzu przedstawione są na rysunku 8 [H1]. Wynika z niego m.in., że dla $\tau_d > \tau_{1/2}$ wydajność jonizacji jest ograniczana przez fakt, że do rozpadu promieniotwórczego dochodzi najczęściej zanim atom dyfunduje do wnętrza wnęki.



Rys. 23. Zmiany wydajności jonizacji z temperaturą wnęki dla izotopów krótkożyciowych dysprozu i europu. Porównanie danych eksperymentalnych i wyników przewidywanych przez model numeryczny.

- Opracowanie poprawki do wspomnianych wcześniej modeli analitycznych opisujących wydajność jonizacji:

$$\beta_s(\beta) = \beta_{theor}(\beta) \exp\left(-\ln 2 \frac{t_{int}}{\tau_{1/2}}\right), \quad (27)$$

gdzie $\beta_{theor}(\beta)$ jest zależnością przewidywaną przez jeden z modeli z pracy [H22], a człon eksponencjalny uwzględnia rozpad promieniotwórczy. Czas przebywania nuklidu we wnętrzu w przypadku $\tau_s=0$ szacowałem korzystając ze wzoru

$$t_{int} = n_{hit} \frac{s}{v}, \quad (28)$$

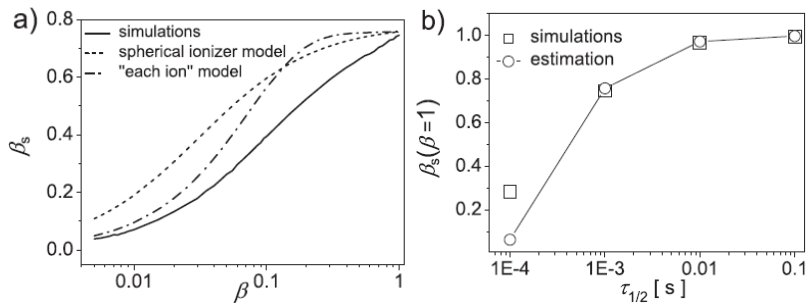
gdzie s jest średnią drogą między zderzeniami ze ściankami, a v to średnia prędkość cząsteczki. Średnią liczbę zderzeń ze ściankami szacuję jako stosunek wewnętrznej powierzchni wnęki S_{int} do powierzchni otworu ekstrakcyjnego S_{ext} :

$$n_{hit} = \frac{S_{tot}}{S_{ext}} = 2\left(\frac{L}{r} + 1\right). \quad (29)$$

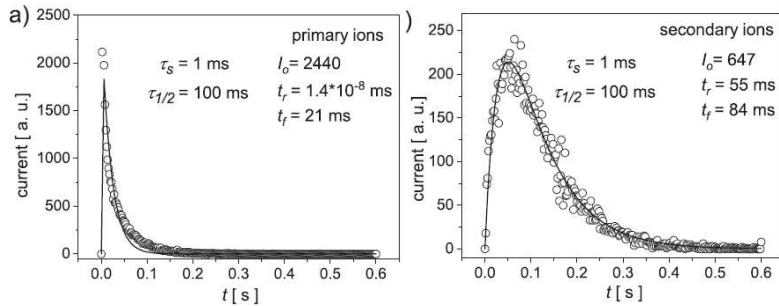
Rysunek 24. prezentuje porównanie wyników obliczonych za pomocą wzorów analitycznych i przy wykorzystaniu modelu numerycznego. Widać na nim dość dobrą zgodność modelu 'each ion' z wynikami obliczeń numerycznych dla $\beta \ll 1$. Rozbieżności są najprawdopodobniej skutkiem wspomnianych wcześniej upraszczających założeń modelu analitycznego dotyczących dryfu cząstek w kierunku otworu ekstrakcyjnego. Godna uwagi jest także doskonała zgodność przewidywań modelu analitycznego i modelu numerycznego jeśli chodzi o wydajność jonizacji dla metali alkalicznych w przypadku $\tau_{1/2} > 1$ ms. Modele analityczne mogą uwzględniać także opóźnienia wylegające z przylegania cząstek do ścianek. W tym celu zmodyfikowałem wzór opisujący średni czas spędzany we wnętrzu uwzględniając w nim średni czas przylegania cząstki:

$$t_{int*} = n_{hit} \left(\frac{s}{v} + \tau_s \right). \quad (30)$$

Porównanie przewidywań różnych modeli przedstawione jest na rys. 5. w pracy [H1].



Rys. 24. Porównanie krzywych $\beta_s(\beta)$ przewidywanych przez modele analityczne z wynikami obliczeń numerycznych (a) oraz porównanie wydajności dla substancji o β bliskim 1 (b). Rys. 3. z pracy [H1].



Rys. 25. Krzywe uwalniania jonów nuklidów pierwotnego (a) i wtórnego (b) uzyskane na drodze modelowania numerycznego (rys. 16 [H1])

- **Dodanie możliwość uzyskiwania tzw. krzywych uwalniania dla poszczególnych izotopów. Pomiary zależności liczby jonów danego nuklidu od czasu są jednymi z podstawowych eksperymentów [149-152] umożliwiającymi uzyskanie informacji o tempie produkcji izotopu, procesie dyfuzji w tarczy, procesie efuzji w jonizatorze itp. Modelowanie numeryczne jest wygodnym narzędziem, które ułatwia interpretację wyników.** Wedle mojej wiedzy, jak dotąd proces ten nie był zbyt często przedmiotem modelowania komputerowego [132-134]. Stworzony przeze mnie program wypełnia tę lukę i pozwala przewidywać zależności uzyskiwanych prądów jonów izotopu pierwotnego i wtórnego w funkcji czasu i badać ich zmiany od wszystkich wspomnianych parametrów fizycznych opisujących układ, takich jak skale czasowe opisujące rozpad promieniotwórczy, dyfuzję i efuzję, geometria jonizatora, jego temperatura itp. Krzywe uwalniania można przybliżyć m.in. wzorem:

$$I(t) = I_o \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{t_r}\right) \right] \exp\left(-\frac{t}{t_f}\right), \quad (31)$$

- gdzie t_r i t_f to skale czasowe opisujące narastanie i opadanie natężenia prądu, które można połączyć ze wspomnianymi wyżej parametrami fizycznymi [149,151]. Przykłady dopasowania krzywych uwalniania tym wzorem zaprezentowałem na rys 25. Opracowany przeze mnie program numeryczny umożliwia także modelowanie eksperymentów typu *hold-up*, w trakcie których mierzy się zmiany natężenia prądu nuklidów w trakcie naświetlania i tuż po jego zaprzestaniu [153,154]. Przykład modelowania takiego eksperymentu, przedstawiony jest na rys. 17. pracy [H1].

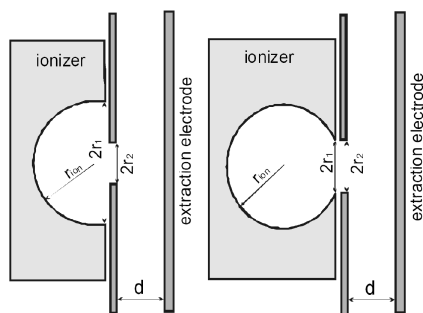
Omawiana powyżej praca zawiera także wyniki obliczeń wpływu jonizacji przez zderzenia z elektronami na wydajność źródła jonów w przypadku izotopów krótkożyciowych (rysunki 13. oraz 14. [H1] ilustrujące zmiany wydajności jonizacji z $\tau_{1/2}$ oraz τ_s). Temat ten został przeze mnie szerzej opisany w pracy [H2] i jest to wedle mojej wiedzy jedyna praca dotycząca wpływu tego dodatkowego kanału jonizacji w źródle z gorącą wnęką.

Najważniejszymi rezultatami zaprezentowanymi w tej pracy są:

- Obliczenia wpływu jonizacji przez zderzenia z izotopami dla izotopów krótkożyciowych (przypadek $\tau_s = 0$). Wykazanie, że **podobnie jak dla izotopów stabilnych wpływ ten jest tym istotniejszy im mniejsze β . Względny udział tego mechanizmu jonizacji może sięgać nawet ponad 200 % wydajności jonizacji powierzchniowej. Względny udział jonizacji przez zderzenia z elektronami w zasadzie nie zależy od $\tau_{1/2}$ (udział rośnie dla bardzo krótkich $\tau_{1/2}$ - rys. 2. z pracy [H2]).**
- Obliczenia wpływu długości czasu przylegania na względną wydajność jonizacji przez zderzenia z elektronami dla izotopów krótkożyciowych. Wykazanie, że **względna wydajność tego mechanizmu rośnie**

wraz z τ_s . Efekt ten jest tym silniejszy, im krótszy jest okres półrozpadu i współczynnik β (rys. 3. z pracy [H2]).

Opracowany przeze mnie model numeryczny pozwala na badanie jonizacji we wnękach nie tylko o kształcie cylindrycznym. W pracy [H12] przedstawiłem wyniki obliczeń przeprowadzonych dla różnego typu wnęk o symetrii sferycznej. Pierwsza konfiguracja, przedstawiona po lewej stronie rysunku 26. to w zasadzie wnęka półsferyczna zdefiniowana przez warunek $r_{ion}=r_1$. Konfiguracja taka przypomina bardzo kształt jonizatorów używanych w niektórych konstrukcjach źródeł jonów [126,127,155]. Druga konfiguracja, przedstawiona po prawej stronie i wyznaczona przez warunek $r_1 = r_2 \ll r_{ion}$ to wnęka sferyczna z niewielkim otworem. Ten typ wnęki, wedle mojej wiedzy, został po raz pierwszy postulowany przeze mnie w omawianej pracy. Przedstawione poniżej wyniki wykażą jego zalety w stosunku do rozwiązań typowych.

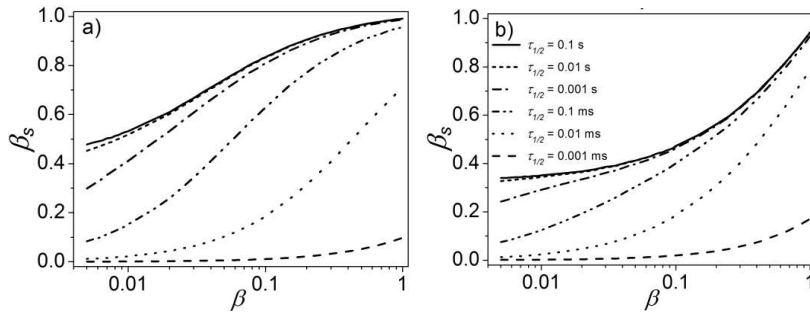


Rys. 26. Dwie konfiguracje wnęk o symetrii sferycznej rozpatrywane w pracy [H12]

- Wykazałem, że **nowa konfiguracja pozwala osiągnąć większe wydajności niż konfiguracja półsferyczna o tych samych promieniach wnęki i otworu ekstrakcyjnego dla identycznych wartości napięcia ekstrakcyjnego**. Co więcej, w przypadku półsferycznym zahamowanie wzrostu wydajności następuje już dla V_{ext} około 0.5 keV, gdyż pole elektryczne wnika w głąb wnęki i wychwytuje jony niemal natychmiast po ich powstaniu. W przypadku wnęki sferycznej sensowne jest stosowanie znacznie większych wartości V_{ext} (nawet do 2 keV), zaś większa liczba zderzeń ze ściankami owocuje wyższą wydajnością jonizacji, zwłaszcza dla niewielkich β (rys. 2. w pracy [H12]).
- Prześledziłem zależność wydajności jonizacji od wielkości opisujących geometrię układu ekstrakcyjnego, tj. promienia otworu ekstrakcyjnego r_2 i odległości d . Wydajności uzyskiwane w przypadku postulowanej konfiguracji są około dwukrotnie większe. W przypadku konfiguracji półsferycznej wydajność praktycznie nie zależy od r_2 w rozpatrywanym zakresie, jako że dla tak płytkiej wnęki pole elektryczne penetruje znaczną jej część. W przypadku głębszej wnęki sferycznej widoczne jest maksimum, w rozpatrywanym przypadku dla $r_2=0.7$ mm (rys 3 a i b w pracy [H12]). Odmienne są także przebiegi krzywych $\beta_s(d)$ w obu rozpatrywanych przypadkach: dla wnęki półsferycznej zmniejszanie odległości między źródłem a elektrodą < 1.5 mm wydaje się być bezcelowe, jako że natężenie pola ekstrakcyjnego jest wystarczająco duże do wychwytywania wszystkich jonów. W przypadku wnęki sferycznej odległość d powinna być tak mała, jak możliwe (rys. 3c i 3d w pracy [H12]), przy czym pamiętać należy o ograniczeniach wynikających z możliwości przebieć elektrycznych między elektrodami.
- Przewaga postulowanej konstrukcji wynika także z danych zaprezentowanych na rys. 4. w [H12]. Przedstawiłem na nim zależności wydajności jonizacji od temperatury jonizatora dla dwu konfiguracji. **Wydajność proponowanej wnęki jest niemal dwukrotnie większa w całym rozpatrywanym zakresie T** - należy jednak pamiętać, że przebieg krzywych $\beta_s(T)$ może się zmieniać w zależności od relacji między pracą wyjścia materiału jonizatora a potencjałem jonizacji badanej substancji.

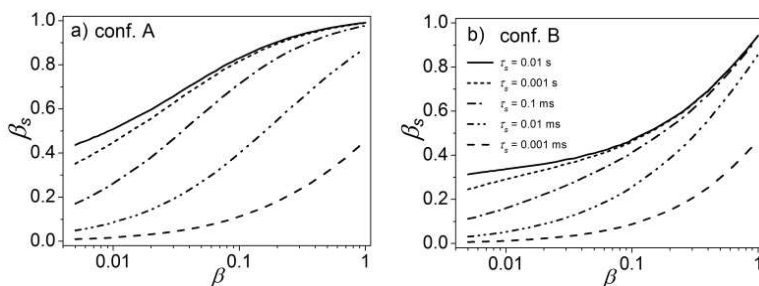
Badałem także jonizację izotopów krótkożyciowych w obu typach wnęk o symetrii sferycznej, wyniki ukażą się w pracy pt. *Ionization of short-lived isotopes in spherical hot cavities* jesienią 2015 roku. Najważniejsze wyniki, które opisałem w tej pracy to:

- Prześledzenie zależności $\beta_s(\beta)$ dla izotopów krótkożyciowych dla obu opisanych wcześniej konfiguracji. Stwierdziłem, że **postulowana przeze mnie konfiguracja o kształcie bliskim pełnej sferze jest o około 40 % bardziej wydajna niż konfiguracja klasyczna**, zwłaszcza dla niewielkich β . Jest to rezultat większej powierzchni jonizatora i ograniczenia strat zachodzących na nieco chłodniejszej płytce z otworem ekstrakcyjnym w konfiguracji klasycznej.



Rys. 27. Zależności $\beta_s(\beta)$ dla izotopów krótkożyciowych (przypadek $\tau_s = 0$) uzyskane dla wnęki sferycznej (a) oraz półsferycznej (b).

- Wykazanie przewagi konfiguracji sferycznej także w przypadku, gdy nie można zaniedbać czasu spędzonego przez atomy na powierzchni jonizatora. Krzywe $\beta_s(\beta)$ przesuwają się w dół, na skutek strat wynikających z rozpadu promieniotwórczego, niemniej jednak wydajność konfiguracji sferycznej jest o kilkadziesiąt procent większa niż w przypadku wnęki półsferycznej (rys. 30. a i b). Jest to konsekwencją faktu, iż średni czas pobytu nuklidu we wnętrze dla konfiguracji klasycznej jest o ponad rząd większy, co jest skutkiem znacznie większej liczby zderzeń z chłodniejszą powierzchnią płytki z otworem ekstrakcyjnym a co za tym idzie, strat na neutralizację jonów.
- Wprowadzenie pojęcia emitancji przeskalowanej, będącej odpowiednikiem jasności wiązki. Wielkość ta pozwala oceniać jakość wiązki wytwarzanej przez źródła jonów w sytuacji, gdy operujemy pojęciem wydajności jonizacji, a nie natężeniami prądów.



Rys. 28. Zmiany zależności $\beta_s(\beta)$ z τ_s uzyskane dla wnęki sferycznej (a) i półsferycznej (b)

Obliczenia z wykorzystaniem opisywanego modelu numerycznego wymagają znacznej mocy obliczeniowej - w szczególności badania wpływu jonizacji przez zderzenia z elektronami wymagają śledzenia trajektorii przynajmniej kilkuset tysięcy cząsteczek. Aby umożliwić uzyskiwanie wiarygodnych wyników w akceptowalnym czasie (raczej kilku godzin niż dni) i wykorzystać możliwości oferowane przez współczesne komputery (wyposażone w wiele jednostek obliczeniowych) oraz klastry, stworzyłem zrównolegloną wersję programu numerycznego. Zainteresowany czytelnik może znaleźć szczegółowy opis programu, strategii jego zrównoleglenia z wykorzystaniem standardu MPI oraz wyniki testów wydajności w pracy [H18]. W tym miejscu jedynie wspomnę, że uzyskałem bardzo dobre skalowanie programu zrównoleglonego, co jest konsekwencją faktu, że nie licząc obliczeń wstępnych i finalnych, program nie zawiera części nie podlegających zrównolegleniu, a więc brak jest ograniczeń narzucanych przez prawo Amdahla [156].

W podobny sposób przeprowadziłem zrównoleglenie i testowanie wydajności programu numerycznego używanego do symulowania wnęk sferycznych. Opis tych badań zamieszczony został w pracy [N13].

Źródła jonów z gorącą wnęką nie są oczywiście jedynym typem źródle wykorzystywanych w instalacjach do badania izotopów krótkożyciowych. Innym typem źródeł jonów opracowanych z myślą o badaniach ISOL jest źródło z plazmą generowaną przez wiązkę elektronów EBG (Electron Beam Generated Plasma) [157], którego odmiany zostały przystosowane do pracy w urządzeniach SPIRAL i EURISOL [158,159]. Jedną z zalet tej konstrukcji są stosunkowo wysokie wydajności jonizacji (~2-5%) w przypadku pierwiastków trudno ulegających jonizacji jak: Be, Ti, V, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt. W pracy [H8] opisane są badania nad opisem krytycznych parametrów pracy źródła EBG przystosowanego dla potrzeb projektu YASNAPP [131]. Praca zawiera także opis obliczeń modelu pozwalającego na obliczenia wydajności jonizacji w przypadku jonizacji izotopów radioaktywnych.

Korzystając z typowych parametrów pracy źródła takich jak gęstość prądu elektronowego emitowanego przez katodę, gęstość elektronów w komorze, średnia energia elektronów, gęstość ekstrahowanego prądu jonowego itp. można oszacować średnią drogę ze względu na jonizację interesującego nuklidu, a co za tym idzie prawdopodobieństwo jonizacji tego nuklidu na drodze porównywalnej z rozmiarami komory źródła jonów (patrz wzór (2) w [H8]). Umożliwia to oszacowanie średniego czasu przebywania nuklidu w komorze (wzór (3) w [H8]). Mając na uwadze, że natężenie prądu jonowego $I_i = 10^{-13} \text{ A}$ wystarcza do zbierania danych spektroskopowych można oszacować minimalną wartość okresu półrozpadu nuklidów, które można obserwować z wykorzystaniem opisywanego źródła jonów (wzór (5) w [H8]).

Pułapka potencjału w źródle jonów z plazmą generowaną przez wiązkę elektronów formuje się przy natężeniu prądu elektronowego odpowiednio dobranym do ciśnienia par we wnętrzu komory źródła jonów, zależnym m.in. od temperatury tarczy. Na podstawie danych zebranych w Tabeli 1. i wzorów (6)-(10) w [H8] oszacowano, że dla temperatury roboczej $T=2600 \text{ K}$ w przypadku tarczy wolframowej krytyczna gęstość prądu elektronowego to 0.7 A/cm^2 , koncentracja atomów wolframu w komorze to $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$. Korzystając ze wzoru (11) można oszacować ekstrahowane natężenie prądu jonów W^+ na $\sim 1.3 \cdot 10^{-6} \text{ A}$. Podobne obliczenia przeprowadzone dla Be, Zr, Hf, Os, Ir, Pt oraz Au prowadzą do wniosku, że temperatura odpowiadająca krytycznej koncentracji par jest dużo niższa niż temperatura 2600 K, zatem tarcze z tych materiałów nie mogą być używane do naświetleń w trybie pracy on-line.

Natężenie ekstrahowanego prądu jonowego w trakcie pracy w trybie on-line zależy od wielu czynników, w tym:

- 1) tempa produkcji nuklidu w naświetlanej tarczy
- 2) tempa pojawiania się atomów na powierzchni tarczy na skutek dyfuzji
- 3) kinetyki procesu desorpcji z powierzchni tarczy (długość czasu przylegania)
- 4) rozpadu promieniotwórczego
- 5) prawdopodobieństwa jonizacji w komorze źródła jonów.

Aby oszacować wspomniane natężenie prądu można posłużyć się modelem opracowanym w [160]. Uwzględniając poprawki związane z cylindrycznym kształtem komory a także wspomniane wcześniej oszacowanie średniego czasu przebywania nuklidu w komorze źródła otrzymuje się wzór na tempo produkcji jonów rozpatrywanego nuklidu o stałej rozpadu λ :

$$I_i = \frac{e\beta_i}{1 + 60\tau\lambda} S_t \sigma \rho G (D/\lambda)^{1/2} \text{th} \left\{ (\delta/2)(\lambda/D)^{1/2} \right\}, \quad (32)$$

w którym e to ładunek elementarny, β_i to prawdopodobieństwo jonizacji, S_t to powierzchnia tarczy, zaś δ - jej grubość, σ - przekrój czynny na reakcje jądrową prowadzącą do powstania nuklidu, ρ - przestrzenna koncentracja atomów tarczy, G - strumień protonów, D - stała dyfuzji, a τ - średni czas przylegania atomu do ścianki komory. Warto zwrócić uwagę na fakt, iż ze wzrostem λ wartość tangensa hiperbolicznego dąży do jedności a wydajność nie zależy od grubości tarczy. W praktyce grubość tarczy powinna być porównywalna z grubością „warstwy roboczej” tj. tej warstwy z której atomy nuklidu promieniotwórczego mają szansę dyfundować na powierzchnię przed rozpadem. Grubość tarczy powinna zatem spełniać warunek:

$$\alpha \equiv \frac{\delta}{2} \sqrt{\frac{\lambda}{D}} \geq 1. \quad (33)$$

Przykładowe wyniki obliczeń wydajności produkcji jonów izotopów W, Ta i Ir przy założeniach zilustrowane są na rys. 3 w [H8]. Wydajność spada poniżej 10 jonów/s dla nuklidów W i Ta o okresie rozpadu ~0.1 s.

D. Badania nad wytwarzaniem wiązek jonów przy użyciu plazmowych źródeł jonów z parownikiem

Domieszkowanie poprzez implantację jonową stało się jedną z najpowszechniejszych technik modyfikowania własności fizycznych i chemicznych ciał stałych, przede wszystkim z racji na stosunkowo niskie koszty tego procesu oraz możliwość precyzyjnego sterowania dawką i energią naświetlania, co przekłada się na koncentrację i rozkład głębokościowy wprowadzanej domieszki. Oprócz bez wątpienia najszerzej rozpowszechnionego zastosowania w przemyśle mikroelektronicznym, jakim jest wytwarzanie domieszkowanych warstw typu *n* bądź *p*, warstw izolujących w procesie SIMOX itp. implantacja jonowa znalazła zastosowanie m.in. także: w fotowoltaice [161,162], w modyfikowaniu własności trybologicznych ciał stałych [163,164], do zwiększania odporności na korozję [165,166], do wytwarzania regularnych nanostruktur (*patterning*) na powierzchni ciała stałego [167], do wytwarzania nanostruktur w półprzewodnikach [P1,P8,168] i polimerach [169], w wytwarzaniu materiałów dla potrzeb spintroniki [170,171] oraz optoelektroniki [172-174].

Powyższa lista zastosowań, daleka od kompletności, oraz krótki przegląd prac, pozwala zorientować, jak zróżnicowane są potrzeby, jeśli chodzi o implantowane jony. Oprócz pierwiastków występujących zazwyczaj w postaci gazów (jak tlen czy gazy szlachetne) domieszkami są bardzo często pierwiastki występujące w postaci wolnej, czy to w postaci najpopularniejszych związków, jako substancje stałe. Istnieje szereg sposobów efektywnego sposobu uzyskiwania wiązek jonów pierwiastków ciał stałych [107,175]:

- Najbardziej oczywistą wydaje się użycie związków bardzo lotnych (jak np. PCl_5 , TiCl_4) bądź gazowych (np. silany) zawierających atomy pożądanego pierwiastka i dozowanie ich do wydajnego źródła jonów stosowanego w przypadku pierwiastków gazowych. Niekiedy stosuje się związki metaloorganiczne [176].
- W przypadku mniej lotnych substancji stosuje się piecyki pozwalające na ich odparowywanie (około 25% wszystkich pierwiastków ma prężność par wystarczającą dla stabilnej pracy źródła jonów przy temperaturze piecyka do ~1100°C). Potrzebny jest też układ transportu par do komory jonizacji źródła jonów, przy czym odpowiednie dozowanie par [177] można zapewnić, przez dobór geometrii transferu, stosując wzór Poiseuille'a :

$$F = \frac{\pi r^4 (P_1 - P_2) (P_1 + P_2)}{16 \eta k T L}, \quad (34)$$

gdzie r i L to promień i długość transferu, P_1 i P_2 wartości ciśnienia na końcach transferu, η - współczynnik lepkości pary, T - temperatura piecyka, zaś k - stała Boltzmanna.

- Źródła z ablacją laserową [178,179] wykorzystują impulsy laserowe o gęstości energii rzędu 10^9 - 10^{11} W/cm² i więcej do rozpylenia materiału naświetlanej tarczy. Powstała chmura plazmy zawiera jony w różnych stanach ładunkowych (zależnie od energii i długości impulsu laserowego), powstałe na skutek oddziaływań z elektronami emitowanymi w trakcie odparowywania plazmy. Często stosuje się też dodatkowe wyładowanie (np. jarzeniowe) celem zwiększenia wydajności i stabilności źródła.
- W przypadku ciekłometalicznych źródeł jonów [180] zachodzi zjawisko emisji jonów z wierzchołka tzw. stożka Taylora, formującego się pod wpływem pola elektrycznego o dużym natężeniu z substancji roboczej w postaci ciekłej. Użyteczną techniką jest stosowanie stopów o temperaturze topnienia niższej niż jego składniki [181-183].
- Atomy pierwiastków ciał stałych mogą być wprowadzane w obszar wyładowania w źródła jonów na skutek rozpylenia materiału tarczy przez jony przyspieszane w kierunku tarczy z odpowiedniego materiału

spolaryzowanej napięciem rzędu ~ 1 kV [184,185]. Niekiedy stosuje się rozpylanie plazmą [186], elektronami [187] a nawet mechaniczne [188].

- Bardzo wydajnym i wszechstronnym rozwiązaniem jest źródło jonów typu MEVVA (MEtal Vapor Vacuum Arc) [189,190], w którym pod wpływem pulsującego wyładowania o natężeniu prądu rzędu 100 A dochodzi do rozpylenia materiału katody i późniejszej jego jonizacji w zderzeniach z elektronami. Uzyskiwane natężenia prądów jonowych sięgają dziesiątek miliamperów, zaś sama wiązka jonowa może mieć szerokość rzędu dziesiątek centymetrów, co czyni to źródło przydatnym do zastosowań przemysłowych. Sterowanie długością czasu wyładowania pozwala na uzyskiwanie jonów w wyższych stanach ładunkowych [191,192].

Szereg czynników, takich jak udział w projekt badawczym zamawianym *Nowe technologie na bazie węgla krzemu i ich zastosowania w elektronice wielkich częstotliwości, dużych mocy i wysokich temperatur* (MNiSW nr. PBZ-MEiN-6/2/2006), realizacja projektu *Badania własności optycznych i elektrycznych struktur MOSLED zawierających nanokropki kwantowe związków półprzewodnikowych AIIIBV lub AIIIVI oraz ziemie rzadkie* (MNiSW NN 515 246637) jak również coraz większe zainteresowanie badaniami wymagającymi naświetleń jonami pierwiastków ciał stałych (Bi, Al, Se) o dawkach rzędu 10^{16} cm⁻² (co przejawiało się dużą liczbą zapytań pochodzących z ośrodków naukowych, zarówno krajowych jak i zagranicznych) skłoniły zespół, w którym pracuję do poszukiwania odpowiednio wydajnego źródła jonów. Nasz zespół poszukiwał źródła jonów, które byłoby:

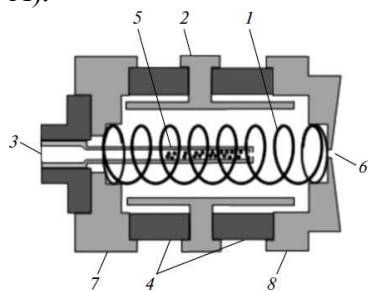
- wydajne i uniwersalne, tj. pozwalało na uzyskiwanie intensywnych wiązek jonów pierwiastków ciał stałych jak i gazowych,
- cechujące się stabilnością pozwalającą na osiągnięcie dawek rzędu 10^{16} - 10^{17} cm⁻²,
- względnie proste w obsłudze i w miarę możliwości nie wymagające kosztownego osprzętu,
- niewielkich rozmiarów, tak by możliwe było jego zastosowanie w implantatorze UNIMAS bez istotnych ingerencji w jego konstrukcję, które utrudniałyby używanie dotychczasowych źródeł jonów.

Wymienione wcześniej rozwiązania cechują się pewnymi ograniczeniami, które ograniczałyby ich przydatność w rozpatrywanym przypadku: źródła ciekłometaliczne sprawdzają się dobrze dla stosunkowo wąskiej gamy substancji; stabilność pracy źródeł laserowych jest ograniczona, zaś samo źródło wymaga dość skomplikowanego osprzętu; stosowanie substancji lotnych takich jak halogenki jest uciążliwe ze względu na fakt, że są silnie żrące, z kolei np. silany są toksyczne i wybuchowe; stosowanie dodatkowego, zewnętrznego piecyka wiąże się z trudnościami związanymi z efektywnym transportem par do komory jonizacji, z drugiej strony konieczne niekiedy jest termiczne izolowanie piecyka od komory wyładowczej (w przypadku substancji o niewielkiej temperaturze topnienia) co w praktyce sprowadza się do konieczności wykonania zestawu wielu piecyków dedykowanych substancjom o różnych temperaturach topnienia. Ponadto efektywność odparowywania substancji o wysokiej temperaturze topnienia, jak np. Cr, Pd czy pierwiastki ziem rzadkich bądź łatwo dostępne ich tlenki jest poważnym ograniczeniem tego rozwiązania; Jedyną wadą źródła jonów typu MEVVA jest jego wysoki koszt, ponadto jego zastosowanie wymagało poważnych przeróbek istniejącej aparatury, także ze względu na ograniczenia konstrukcyjne układu formowania wiązki.

Pierwotnym rozwiązaniem pozwalającym na stosowanie substancji stałych jako materiału do produkcji jonizowanych par było zastosowanie wydrążonej anody w źródle z katodą wnękową typu Sideniusa [85], jak jest to przedstawione na rys. 1a. w pracy [H7]. Anoda będąca jednocześnie wewnętrznym piecykiem ogrzewana była przez wyładowanie palące się w obszarze między nią a katodą. Źródło o takiej konstrukcji zostało użyte m.in. do wykonania implantacji jonami Bi⁺ [193]. Zasadniczą wadą tego rozwiązania była podatność odsłoniętych izolatorów na naparowywanie, co prowadziło do przebieg między anoda i katodą i w rezultacie znacznego ograniczenia czasu pracy źródła jonów. Kolejny problem wynikał z faktu, że anoda stanowiąca jednocześnie pojemnik na ogrzewaną substancję miała stosunkowo duże rozmiary i masę, co w znacznym stopniu ograniczało osiąganą przez nią temperaturę - rozwiązanie funkcjonowało w przypadku

bizmutu (temperatura topnienia 271°C), ale już otrzymywanie jonów glinu (660°C) przysparzało poważnych problemów.

Aby uporać się z opisywanymi wyżej problemami zaproponowałem nowatorskie rozwiązanie: zastosowanie niewielkiego (długości pierwotnie 20-30 mm) tygielka, zwanego dalej parownikiem umieszczanego bezpośrednio w komorze wyładowczej źródła jonów. Konstrukcja komory pokazana jest na rys. 29. Parownik wykonany jest z molibdenu, jego zewnętrzna średnica to ~3 mm, a wewnętrzna to 2 mm. Parownik wypełniany jest substancją roboczą (zazwyczaj w postaci proszku, płatków lub drobnych kawałków - patrz: Tabela 1 w [H7]). Katoda wykonana jest z drutu wolframowego o średnicy 0.75 mm i grzana przez przepływ prądu o natężeniu 25-35 A, co wywołuje termoemisję elektronów, podtrzymujących wyładowanie palące się między anodą a katodą (typowe napięcie wyładowania to 30-40 V, natężenie prądu wyładowania do 5 A).



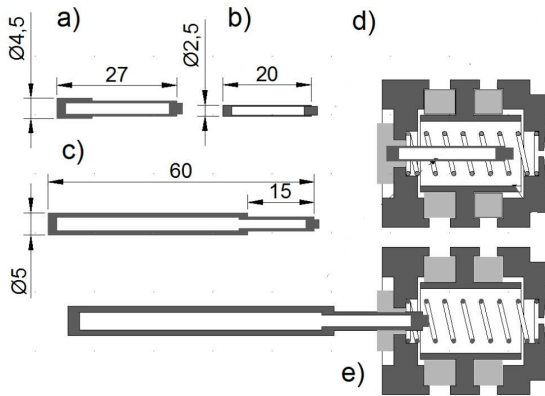
Rys. 29. Konstrukcja komory wyładowczej źródła jonów z cylindryczną anodą i parownikiem. 1 - katoda (W), 2 - anoda (Mo), 3 - doprowadzenie gazu roboczego (opcjonalne) 4 - izolatory (BN), 5 - parownik (Mo), 6 - otwór ekstrakcyjny, 7, 8 - mocowania katody (Mo).

Wyładowanie palące się między katodą a anodą ogrzewa parownik. Pewną rolę w ogrzewaniu parownika odgrywa również otaczające go rozgrzane włókno katody. Pary substancji roboczej wydostają się z jego końcówki zakończonej śrubką o dość luźnym gwincie i trafiają bezpośrednio w obszar wyładowania, gdzie atomy są jonizowane na skutek zderzeń z elektronami, osiągającym wystarczająco duże energie po przebyciu obszaru katodowego spadku potencjału. Należy w tym miejscu wspomnieć, że cylindryczna anoda stanowi jednocześnie doskonałą osłonę wykonanych z azotku boru izolatorów. Owocuje to znacznym ograniczeniem problemów z przebiciami.

Komora źródła otoczona jest przez cewkę elektromagnesu, którego zadaniem jest częściowe kompensowanie wpływu silnego pola magnetycznego pochodzącego od spiralnej katody i w ten sposób oddziaływanie na napływ plazmy w bezpośrednie sąsiedztwo otworu ekstrakcyjnego [194]. Uproszczony schemat konstrukcji całego źródła jonów pokazany jest na rysunku 1. w pracy [H11]. W tejże pracy, jak również w pracach [H14, H7, N17] zainteresowany czytelnik znaleźć może więcej szczegółów na temat budowy i zasady działania źródła jonów.

Jak wcześniej podkreślałem, opracowywane źródło jonów powinno być uniwersalne, to jest w miarę możliwości wytwarzać wiązki jonów z wykorzystaniem zarówno gazów jak i substancji stałych o rozmaitych temperaturach topnienia jako substancji roboczych. Korzystanie z gazów jest szczególnie proste, choćby z tego względu, że omawiane rozwiązanie bazuje na konstrukcji Nielsena [195]: wystarczy w miejsce mocowania parownika wprowadzić stalową kapilarę i połączyć ją z zaworem dozującym. Kwestia sterowania temperaturą parownika jest nieco bardziej złożona. W ograniczonym zakresie można to osiągnąć przez zwiększanie bądź zmniejszanie natężenia prądu wyładowania oraz prądu grzania katody. Należy jednak mieć na uwadze, że np. w przypadku substancji lotnych i o niskiej temperaturze topnienia nadmierna redukcja wartości natężeń wspomnianych prądów radykalnie ograniczy wydajność jonizacji. Z drugiej zaś strony utrzymanie tych parametrów na odpowiednio wysokim (dla potrzeb wyładowania) poziomie spowoduje nadmierne nagrzanie standardowo umiejscowionego tygielka, przedwczesne ulotnienie się substancji roboczej i radykalny spadek natężenia prądu jonowego. Najrozsądniejszym rozwiązaniem jest dostosowanie rozmiaru i umiejscowienia parownika do własności substancji roboczej. Kwestia ta była poruszona w pracach [H7, H11] (patrz np. rysunek 2. [H7] przedstawiający trzy wersje parownika). Kwestii doboru parownika w zależności od temperatury topnienia substancji roboczej w całości poświęcona jest praca *Tailoring the internal evaporator for effective ion*

beam production - volatile vs. non-volatile substances (autorzy: M. Turek, A. Drożdżel, K. Pysznik, S. Prucnal), której ukazanie się planowane jest na koniec 2015 r. Zaczerpnięty z niej rysunek 30. ilustruje różnice między „standardowym” parownikiem a parownikiem używanym dla substancji o wysokiej temperaturze topnienia, lub przeznaczonym dla substancji o niskiej temperaturze topnienia.



Rys. 30. Różne wersje parowników: „standardowa” (a), używana dla substancji o wysokiej temperaturze topnienia, jak Cr, Pd (b) oraz dedykowana dla substancji łatwo lotnych i o niskiej temperaturze topnienia, jak Zn, P, In, As, S (c). Pokazane są też skrajne warianty umiejscowienia parowników w komorze źródła, tak by osiągać maksymalnie wysokie (d) lub stosunkowo niewielkie ich temperatury (e).

W pracy tej zaproponowałem też model opisujący grzanie/chłodzenie parownika. Zakładając, że ciało ma masę m i pojemność cieplną c , a ciepło dostarczane jest do niego w tempie $\dot{Q}$, to zmiany jego temperatury opisane są wzorem [196]:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q}}{mc} - \frac{\alpha}{mc}(T - T_e), \quad (35)$$

gdzie α to stała opisująca tempo chłodzenia, a T_e to temperatura otoczenia. Rozwiązanie tego równania (o ile nie zachodzi przemiana fazowa) dane jest wzorem:

$$T = T_e + \frac{\dot{Q}}{\alpha} \left(1 - \exp\left(-\frac{\alpha t}{mc}\right) \right), \quad (36)$$

skąd temperatura równowagowa to $T_{eq} = T_e + \frac{\dot{Q}}{\alpha}$. Stosunek przyrostów temperatur (powyżej T_e) w przypadku krótkiego parownika niemal w całości umieszczonego w komorze (s) i w przypadku parownika bardzo długiego (l) dany jest wzorem:

$$x_{sl} = \frac{T_{eq(s)} - T_e}{T_{eq(l)} - T_e} = \frac{\dot{Q}_s \alpha_l}{\dot{Q}_l \alpha_s}. \quad (37)$$

Przyjąłem, że stosunek stałych opisujących grzanie i chłodzenie parownika zależy przede wszystkim od jego geometrii (pola powierzchni ogrzewanej i chłodzonej) i otrzymałem wynik $x_{sl} \approx 24$, oznaczający, że w zasadzie przy opisanych założeniach konstrukcyjnych osiągalny jest cały potrzebny zakres temperatur potrzebnych do jonizacji substancji zarówno o niskiej jak i wysokiej lotności, co zostało potwierdzone eksperymentalnie.

Opisane powyżej źródło jonów było testowane eksperymentalnie z wykorzystaniem kilkudziesięciu substancji. Celem sprawdzenia wydajności źródła i sklasyfikowania optymalnych parametrów pracy dla szerokiej gamy substancji roboczych zaproponowałem pomiary podstawowych charakterystyk:

- zależności natężenia prądu jonowego I_{ion} oraz napięcia wyładowania U_a od natężenia prądu wyładowania I_a
- zależności natężenia prądu jonowego I_{ion} oraz napięcia wyładowania U_a od natężenia prądu wyładowania grzania katody I_c
- zależności natężenia prądu jonowego I_{ion} oraz napięcia wyładowania U_a od indukcji pola magnetycznego zewnętrznego elektromagnesu źródła B

Szczegółowy opis zestawu eksperymentalnego bazującego na implantatorze UNIMAS znaleźć można w pracy [H11], tam też na rysunku 2. przedstawiony jest schemat tego zestawu. Dla kompletności opisu podane zostaną jedynie podstawowe informacje. Wiązka jonowa ekstrahowana była dla każdej substancji przy

wykorzystaniu napięcia ekstrakcyjnego $U_{ext}=25$ kV. Uformowana wiązka przechodziła przez elektromagnetyczny separator mas, a następnie przyspieszana była napięciem $U_{acc}=75$ kV. Podawane natężenia prądów jonowych dotyczą wiązek rozseparowanych, mierzonych tuż przed wprowadzeniem ich do układu przemiatania wiązki.

Jedną z pierwszych testowanych substancji był glin, w związku z faktem realizacji wspomnianego już wcześniej projektu *Nowe technologie na bazie węgla krzemu i ich zastosowania w elektronice wielkich częstotliwości, dużych mocy i wysokich temperatur*, w którym implantacje Al^+ do SiC odegrały ważną rolę w wyprodukowaniu pierwszych w Polsce urządzeń mikroelektronicznych bazujących na SiC. Wyniki pomiarów charakterystyk roboczych dla Al przedstawiłem w pracy [N17]. Charakterystyki dla Cr, Fe, Mn, In, As można znaleźć w [H11] zaś dla Be, V, Te, Cd i Ga w [H7]. Praca [H14] przedstawia wyniki dla Eu i innych pierwiastków ziem rzadkich i będzie omówiona nieco później.

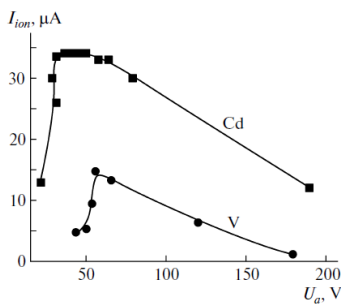
Najbardziej typowe zachowanie zależności $I_{ion}(I_a)$ oraz $I_{ion}(U_a)$ obserwowałem dla substancji o pośredniej lub wysokiej temperaturze topnienia, jak Al, Te, V, Cr czy Be. Natężenie prądu jonowego rośnie niemal liniowo z I_a co jest związane z rosnącym wraz z I_a , a co za tym idzie - gęstością elektronów i prawdopodobieństwem jonizacji w wyładowaniu. Jest to zgodne ze wzorem opisującym gęstość ekstrakowanego prądu jonów o ładunku q w funkcji gęstości prądu wyładowania j_a :

$$j_{ion} = q \frac{n_o v_o}{4} P(\sigma, j_a, l, v_o), \quad (38)$$

jeśli przyjmiemy, że wyrażenie opisujące prawdopodobieństwo jonizacji atomu

$P(\sigma, j_a, l, v_o) = 1 - \exp(-\sigma j_a l / v_o q)$ możemy zlinearyzować. W powyższych równaniach σ oznacza średni przekrój czynny na jonizację, v_o - to średnia prędkość atomów, l - średni dystans pokonywany przez atom w wyładowaniu, zaś n_o - to koncentracja atomów. Nie należy też zapominać że zwiększenie natężenia I_a powoduje wzrost temperatury parownika, a co za tym idzie, ciśnienia par w komorze źródła. Z drugiej strony wzrost koncentracji ładunku powoduje spadek U_a , co z kolei prowadzi do zmniejszenia energii elektronów w wyładowaniu i ograniczenia efektywności jonizacji. Efekt ten hamuje wzrost natężenia prądu jonowego z I_a , co jest widoczne dla Al, Te, As czy V.

Nieco inny schemat obserwowany jest dla bardziej lotnych substancji roboczych, wymagających zazwyczaj niższych wartości prądu żarzenia I_c do uzyskania stabilnego wyładowania (jak Mn, In, Ga czy Cd). W tym przypadku obserwowany jest raczej wzrost napięcia wyładowania (a co za tym idzie energii elektronów) wraz I_a , zatem nie ma wyraźnego zahamowania wzrostu I_{ion} w rozpatrywanym zakresie I_a .



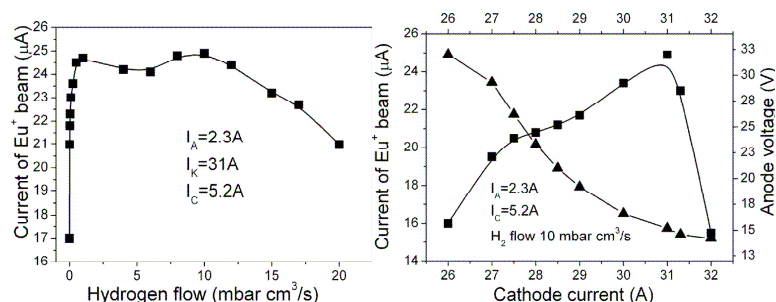
Rys. 31. Zależności $I_{ion}(U_a)$ otrzymane przez połączenie zmierzonych w eksperymencie charakterystyk $I_{ion}(I_c)$ oraz $U_a(I_c)$.

Schemat wzrost-optimum-spadek jest obserwowany w większości zmierzonych charakterystyk $I_{ion}(I_c)$ (rys. 7. w [H11] oraz 6. w [H7]). Wyjaśnienie tego przebiegu jest nieco bardziej złożone. W pierwszej fazie obserwowany jest zazwyczaj wzrost I_{ion} na skutek wzrostu temperatury parownika, a więc i koncentracji par. Ponadto wraz z ze wzrostem prądu żarzenia rośnie emisja elektronowa, skutkiem czego obserwowany jest zawsze spadek wartości napięcia wyładowania. Jak poprzednio, skutkuje to spadkiem wydajności jonizacji gdy energia elektronów staje się zbyt niska. Związek zależności natężenia prądu jonowego ze zmianami przekroju czynnego na jonizację z energią wydaje się oczywisty, gdy przedstawimy natężenie I_{ion} w funkcji U_a . Przebiegi $I_{ion}(U_a)$ oraz $\sigma(E)$ są bardzo zbliżone.

Zależności $I_{ion}(B)$ oraz $U_a(B)$ przedstawione są m.in. na rys. 9. w pracy [H11] oraz 9. w [H7]. Na ogół obserwowane jest dość szerokie maksimum dla B w zakresie 6-10 mT. W przypadku niektórych substancji (jak Be) pożądane jest tak duże B jak to tylko możliwe.

Godnym podkreślenia jest moim zdaniem spostrzeżenie zawarte w pracy [H11], dotyczące związku między uporządkowaniem pierwiastków ze względu na osiągnięte natężenia prądów (Tabela 1.) a ich kolejnością na rys. 11. w tej pracy, przedstawiającym związek między temperaturą substancji a prężnością jej par. **Z porównania tych danych wynika, że to prężność par wydaje się lepszym (niż temperatura topnienia) estymatorem „łatwości”, z jaką dana substancja może być wykorzystana do wytwarzania wiązek jonowych.** Warto zwrócić uwagę np. na różnicę w temperaturach topnienia In oraz Mn, posiadających zbliżone wartości prężności par.

W przedstawionych do tej pory przypadkach w parowniku umieszczane były po prostu te pierwiastki (w postaci wolnej), których jony zamierzałem produkować. Możliwe, a czasami wręcz wskazane jest wykorzystanie tzw. wewnętrznej syntezy substancji roboczej mającej miejsce w sytuacji, gdy wykorzystujemy bardzo wysoką temperaturę plazmy do podtrzymywania zachodzących w komorze źródła reakcji chemicznych mających na celu wytworzenie bezpośrednio w jej wnętrzu zasadniczej substancji roboczej w oparciu o inne związki chemiczne umieszczone uprzednio w komorze bądź doprowadzane do niej w trakcie pracy źródła jonów. Przykładem takiego trybu pracy źródła jest **nowatorska metoda wytwarzania jonów pierwiastków ziem rzadkich w oparciu o ich chlorki**, który opisałem w pracy [H14]. W średniej wielkości parowniku umieszczone było ok. 5 mg chlorku europu (Eu_2Cl_3). Substancja ta rozpada się na europ i chlor w temperaturze 623°C , a więc o ponad 200°C niższej niż temperatura topnienia metalicznego Eu. Substancja ta też jest silnie higroskopijna, tworząc $\text{Eu}_2\text{Cl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, który podczas ogrzewania przekształca się w bardziej trwały tlenochlorek europu EuClO . Aby zapobiec tym niepożądanym reakcjom do komory źródła dozowany był gazowy wodór (naciek $\sim 10 \text{ mbar cm}^3 \text{ s}^{-1}$). Jak widać na rys 32. odcięcie dopływu wodoru powoduje zahamowanie produkcji jonów Eu^+ . Źródło jonów testowane było w sposób identyczny jak opisany powyżej. Stwierdzono, że optymalne natężenie prądu grzania katody jest dość wysokie, rzędu 31 A. Dalsze jego zwiększanie skutkuje jednak niepożądanym spadkiem napięcia wyładowania poniżej 16 V, co drastycznie ogranicza wydajność jonizacji. W przypadku zależności $I_{ion}(I_a)$ wysycenie charakterystyki obserwowane jest już powyżej $I_a = 2 \text{ A}$. Podsumowując, zaproponowana przeze mnie metoda pozwala na uzyskiwanie prądów Eu^+ rzędu $25 \mu\text{A}$ przy użyciu stosunkowo niewielkiego źródła o mocy 350 W, co jest wynikiem porównywalnym z osiągnięciami innych konstrukcji [197], w tym renomowanych dostawców tego typu sprzętu [198].



Rys. 32. Zależność uzyskiwanego natężenia prądu jonowego Eu^+ od nacieku H_2 (rys.7. [H14]-po lewej) oraz zależność natężenia prądu Eu^+ od natężenia prądu grzania katody. (rys.5. [H14] -po prawej).

Inny przykład zastosowania reakcji chemicznych zachodzących w komorze plazmowej źródła jonów opisany został w pracy [H3], w której przedstawiłem metodę uzyskiwania intensywnych wiązek molibdenu. Pewną sugestią skłaniającą do jej opracowania był fakt, że w trakcie wytwarzania wiązki Eu^+ z chlorku europu obserwowałem dość wyraźny wierzchołek w widmie masowym pochodzący od jonów Mo^+ . Skądinąd wiadomo, że plazma zawierająca chlor w postaci atomowej bądź cząsteczkowej trawi molibden dość szybko ($\sim 20 \text{ nm/min}$), zwłaszcza w podwyższonej temperaturze [199]. Proces ten może być jeszcze bardziej przyspieszony poprzez domieszkę tlenu [200].

Konfiguracja źródła jonów, jaką zaproponowałem celem wydajnej produkcji jonów Mo^+ przedstawiona jest na rys. 1. w [H3]. Mieszanina par CCl_4 (bądź CHCl_3) i powietrza dozowana jest poprzez zawór iglicowy do źródła jonów ($\sim 10 \text{ mbar cm}^3 \text{ s}^{-1}$). Gorąca plazma wyładowana łukowego zawierająca chlor i tlen trawi anodę i inne elementy źródła wykonane z molibdenu. Atomy molibdenu uwolnione z powierzchni są następnie jonizowane w wyładowaniu. W artykule [H3] zaprezentowano charakterystyki robocze źródła jonów Mo^+ otrzymane zarówno dla CCl_4 jak i CHCl_3 . Najważniejsze wnioski z ich analizy:

- Wydajność źródła dla obu użytych chloropochodnych metanu była zbliżona.
- W obu przypadkach $I_a=3 \text{ A}$ oraz $B = 7 \text{ mT}$ wydaje się być optymalnym wyborem.
- Utrzymując napięcie wyładowania na poziomie 40-50 V, co wymaga natężenia prądu żarzenia rzędu 31 A można uzyskać natężenia prądu jonowego rzędu $18 \mu\text{A}$, co pozwala na wykonywanie naświetleń rzędu 10^{15} - 10^{16} cm^{-2} w jednym cyklu pracy. Naświetlania takie mogą być wykorzystane do zwiększania odporności metali na korozję [165,166], poprawiania ich własności trybologicznych [201], bądź też do wytwarzania warstw smarujących MoS_2 [202].

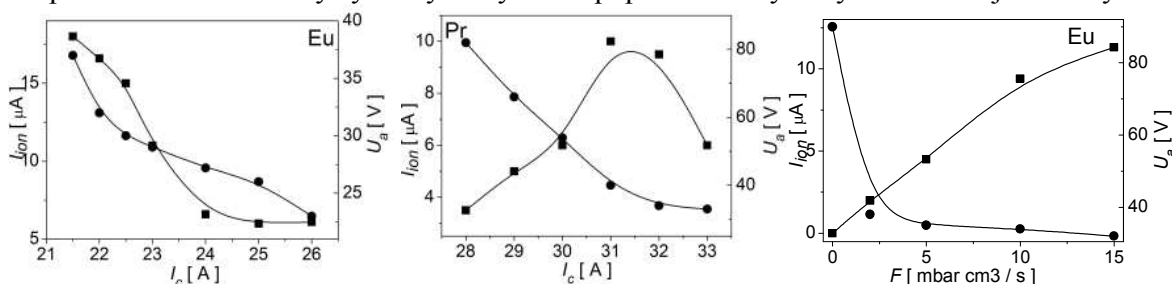
Wewnętrzna synteza zastosowana została w zaproponowanej przeze mnie metodzie wytwarzania wiązek jonów pierwiastków ziem rzadkich, zaprezentowanej w czerwcu 2015 na IX Międzynarodowej Konferencji NEET w Zakopanem. Opisywana metoda jest zbliżona do tej zastosowanej do produkcji jonów żelaza z hematytu w mikrofalowym źródle jonów [203]. Tlenki pierwiastków ziem rzadkich (Eu_2O_3 , Gd_2O_3 , Ho_2O_3 , Pr_2O_3), które same z siebie są niezbyt użytecznymi substancjami roboczymi z racji na ich wysokie temperatury topnienia (Eu_2O_3 - 2350°C , Gd_2O_3 - 2420°C , Ho_2O_3 - 2415°C , Pr_2O_3 - 2183°C) wprowadzane są bezpośrednio do komory wyładowania źródła jonów. Jednocześnie do tej komory dozowane są pary CCl_4 . Na skutek reakcji chemicznych dochodzi do produkcji bardziej lotnych substancji chemicznej jaką są chlorki pierwiastków ziem rzadkich. Pierwszym możliwym kanałem produkcji chlorków ziem rzadkich jest destruktywna adsorpcja CCl_4 na powierzchni tlenków. Towarzysząca jej dyfuzja atomów chloru w głąb tlenku owocuje jego transformacją w chlorek [204]:



Kolejny możliwy kanał produkcji chlorków ma związek z termicznym rozkładem CCl_4 , wg. przykładowych reakcji [205]:



Następnym etapem jest tworzenie tlenochlorków [206], a potem chlorków ziem rzadkich, których jonizacja przebiega podobnie jak w przypadku opisanym w [H14]. Odcięcie dopływu par CCl_4 powoduje gwałtowny wzrost napięcia anodowego i spadek wydajności źródła jonów (rys 33). W przygotowywanej pracy zamieściłem charakterystyki zmierzone dla czterech wymienionych wcześniej tlenków ziem rzadkich. Mają one przebiegi dość podobne do charakterystyk uzyskanych dla poprzednio używanych substancji roboczych



Rys. 33. Wybrane charakterystyki $I_{ion}(I_a)$ oraz $U_a(I_a)$ dla wiązek jonów pierwiastków ziem rzadkich uzyskanych z ich tlenków oraz natężenie prądu Eu^+ i napięcie wyładowania w funkcji nacieku par CCl_4

Wnioski, jakie można osiągnąć analizując charakterystyki:

- Optymalne napięcie wyładowania dla wspomnianych substancji to około 40 V.

- Opisywana metoda wymaga utrzymywania możliwie dużej wartości indukcji magnetycznej zewnętrznego pola magnetycznego (~ 12 mT).
- Uzyskane natężenia prądów jonowych rozseparowanych wiązek to $18 \mu\text{A}$, $5 \mu\text{A}$, $3 \mu\text{A}$ i $12 \mu\text{A}$ odpowiednio dla Eu^+ , Gd^+ , Ho^+ oraz Pr^+ , co czyni metodę przydatną dla potrzeb domieszkowania tymi jonami.

Testowana była także stabilność pracy źródła z parownikiem umieszczonym w komorze wyładowania. Przykładowe wyniki (dla Mn, Sb i Ga) zaprezentowane są na rys. 10. w pracy [H7]. Drobne korekty parametrów pracy źródła (przede wszystkim I_c) a także stosowanie odpowiednio dobranego, dużego parownika (w przypadku In, P, As itp.) pozwalają utrzymać stałe natężenie prądu jonowego przez wiele godzin, co umożliwia wykonywanie naświetleń jonami pierwiastków ciał stałych z dawkami 10^{16} - 10^{17} cm^{-2} . Możliwość wykonywania tego typu implantacji szeroką gamą jonów zaowocowała m. in. wytworzeniem nanokropek InAs w nanodrutach krzemowych [P1], wytworzeniem różnego typu nanostruktur półprzewodnikowych $\text{A}_{\text{III}}\text{B}_{\text{V}}$ w Si/SiO₂ [P4,P5,P7,P8,N5] itp. Dzięki swej uniwersalności, wydajności i stabilności pracy omawiane źródło jonów z parownikiem wewnętrznym stało się podstawową konstrukcją stosowaną przez zespół pracowników IF UMCS zajmujących się implantacją jonową. Ponadto **wzięłem udział w opracowaniu wariantu źródła jonów z parownikiem dostosowanego do potrzeb Laboratorium Problemów Jądrowych Zjednoczonego Instytutu Badań Jądrowych w Dubnej**. Źródło to zostało skonstruowane i wykonane w IF UMCS, a następnie przekazane do ZIBJ, gdzie zostało zainstalowane i wspólnymi siłami uruchomione, w czym miałem ogromną satysfakcję uczestniczyć.. Podsumowując, natężenia prądów jonowych uzyskiwanych przy użyciu zaproponowanego przeze mnie rozwiązania zestawilem w poniższej Tabeli 1., korzystając z danych zawartych w Tab. 1. w [H11] oraz Tab. 1. w [H7].

Dla porównania dane te zestawilem z natężeniami prądów jonowych uzyskiwanych przy wykorzystaniu komercyjnego źródła jonów o podobnej wielkości i mocy (SO-55 firmy HighVoltage Eng. [198]). **Osiągi obu konstrukcji są porównywalne, przy czym godne podkreślenia jest, że dla niektórych substancji stałych (jak Zn, As czy P) wydajność konstrukcji z parownikiem jest niemal dwukrotnie większa.**

Tabela 1. Zestawienie natężeń prądów jonowych uzyskiwanych za pomocą źródła z cylindryczną anodą i parownikiem z deklarowanymi osiąganymi źródła SO-55.

Jon	$I [\mu\text{A}]$	$I [\mu\text{A}]$ (SO-55)	Jon	$I [\mu\text{A}]$	$I [\mu\text{A}]$ (SO-55)
Al^+	60	60	In^+	70	75
Ar^+	90	100	Mn^+	60	
As^+	100	50	Mo^+	18	
Be^+	12		Ni^+	40	
Cd^+	35	40	P^+	110	75
Cr^+	11		Pd^+	25	
Cu^+	50		Sb^+	45	40
Eu^+	25		Se^+	35	
Fe^+	15		S^+	20	
Ga^+	40		Te^+	40	
He^+	45	100	V^+	15	
H^+	60	100	Zn^+	75	30
H_2^+	100				

Celem pełniejszego zbadania wpływu koncentracji elektronów w wyładowaniu łukowym, temperatury plazmy, napięcia ekstrakcyjnego i innych parametrów na wydajność jonizacji źródła **opracowałem numeryczny model jonizacji w komorze źródła**. Model ten opisany jest w pracach [H11,H14,P13]. Program

numeryczny śledzi trajektorie cząstek (neutralnych i naładowanych) w komorze wyładowania plazmowego źródła jonów. Rozkład potencjału elektrostatycznego w źródle znajduje się poprzez rozwiązywanie równania Poissona, biorąc pod uwagę stosowne warunki brzegowe, tj. kształt i potencjały elektrod. Narzucając warunki brzegowe starałem się odtworzyć m.in. anodowy spadek potencjału. Wytworzone jony opuszczają źródło przez otwór ekstrakcyjny o średnicy 1 mm. Płaska elektroda ekstrakcyjna usytuowana jest w odległości ~10 mm od przedniej ścianki źródła. Wartość napięcia ekstrakcyjnego zmieniana była w zakresie od zera do kilkudziesięciu kV. Modelowany obszar, obejmujący komorę plazmową źródła i elektrodę ekstrakcyjną, pokryty został trójwymiarową siatką kartezjańską. Typowe wymiary komórek siatki to $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1$ mm. Rozkład potencjału wyznaczany jest poprzez rozwiązanie równania Poissona metodą kolejnych nadrelaksacji. Równania ruchu całkowane są przy użyciu schematu Rungego-Kutty czwartego rzędu. Neutralne atomy opuszczają parownik, a ich prędkości początkowe odpowiadają kT_i rzędu 0.15 eV. Atomy dostają się w obszar wyładowania łukowego, gdzie może dojść do ich jonizacji na skutek zderzeń z szybkimi elektronami. Średnia droga swobodna neutralnego atomu w plazmie wyładowania, przebyta do momentu jonizacji szacowałem przy użyciu wzoru:

$$\lambda(T_e, n_e) = \left(n_e \int_0^{\infty} \sigma(E) f(E, T_e) dE \right)^{-1}, \quad (43)$$

gdzie $\sigma(E)$ - przekrój czynny na jonizację atomów glinu poprzez zderzenie z elektronami [207-210], $f(E, T_e)$ - rozkład Maxwella-Boltzmanna odpowiadający temperaturze elektronowej w łuku T_e zaś n_e - koncentracja elektronów. Procedura wykorzystująca metodę Monte Carlo wyznacza drogę, którą przebywa dany atom do momentu jonizacji w oparciu o wzór:

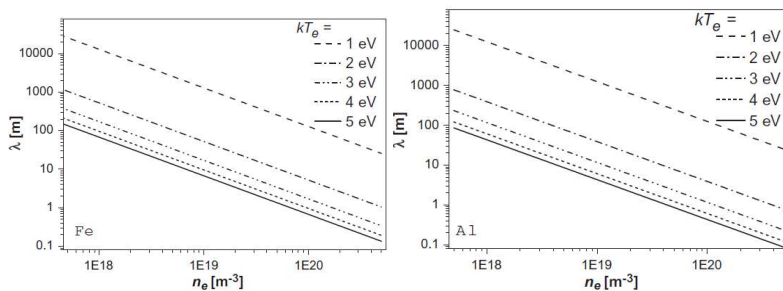
$$\lambda_i = -\lambda(T_e, n_e) \ln(RND), \quad (44)$$

przy czym RND jest liczbą pseudolosową z przedziału (0,1). Program zlicza jony i atomy przechodzące przez otwór ekstrakcyjny. Całkowita wydajność jonizacji źródła jest zdefiniowana jako stosunek liczby jonów opuszczających źródło do liczby wszystkich cząstek:

$$\beta_s = \frac{N_+}{N_o + N_+}. \quad (45)$$

Opisany powyżej model numeryczny pozwala m.in. na:

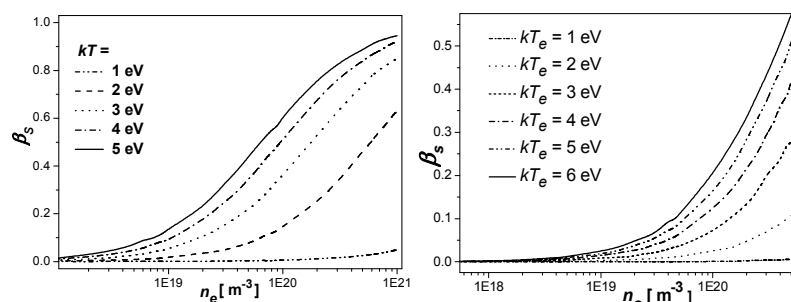
- szacowanie zależności średnich dróg swobodnych w zależności od temperatury plazmy i gęstości elektronów. Jak widać na rys 34. średnia droga swobodna wyraźnie zależy od temperatury plazmy w wyładowaniu łukowym i maleje od dwa rzędy wielkości, gdy kT_e rośnie od 1 eV do 5 eV. Średnia droga swobodna ze względu na jonizację silnie zależy też od koncentracji elektronów, sięgając wartości rzędu kilkunastu czy kilkudziesięciu centymetrów dla n_e większych od 10^{20} m^{-3} . Zestawienie oszacowań średnich dróg swobodnych dla Fe, Eu, Al i Er znaleźć można na rys. 3b. w pracy [P13], przy czym należy mieć na uwadze, że na wartość uzyskiwanych natężeń prądów wpływ ma zarówno wydajność jonizacji ale i szybkość parowania danej substancji.



Rys. 34. Zależności średniej drogi swobodnej ze względu na jonizację od temperatury i koncentracji elektronów w plazmowym źródle jonów.

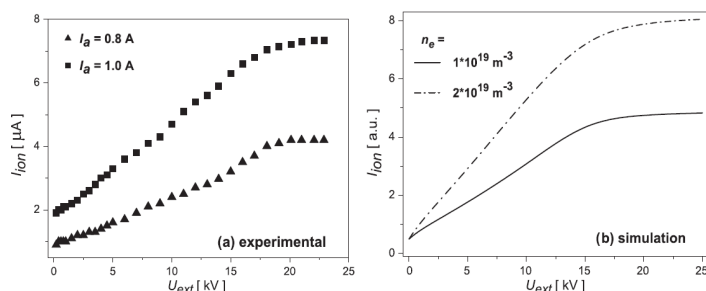
- obliczanie zależności wydajności jonizacji źródła o zadanej geometrii od gęstości elektronów i temperatury plazmy. Doskonale widać, że wydajność źródła szybko rośnie z n_e - ze wzoru (43) wynika, że

im większa koncentracja elektronów, tym większe jest prawdopodobieństwo jonizacji przez zderzenie z elektronami. Wydajność jonizacji dla glinu jest wyraźnie większa niż dla żelaza, jak można było przypuszczać analizując wartości średnich dróg swobodnych. Uzyskane wyniki sugerują, że pożądane jest utrzymywanie dość dużych wartości prądu anodowego, co jest zgodne z doświadczeniem. Wyniki obliczeń dla Eu przedstawiłem w pracy [H14].



Rys. 35. Zależności wydajności jonizacji od gęstości dla różnych wartości kT_e . Wyniki dla Al [N17] (po lewej) oraz Fe [P13] (po prawej)

- Obliczenia zależności wydajności jonizacji od potencjału elektrody ekstrakcyjnej. Załączony rysunek 36. zawiera porównanie rezultatów obliczeń numerycznych dla Fe [H11] i eksperymentu. Widoczna jest dobra zgodność przewidywań modelu z wynikami pomiarów. W obu przypadkach obserwowane jest wysycenie krzywej dla napięcia ekstrakcyjnego powyżej ~ 18 kV. Natężenie ekstrahowanego prądu rośnie z natężeniem prądu wyładowania/gęstością elektronów. Doświadczalne krzywe prądowo-napięciowe cechują się punktem przegięcia, związanym ze zmianą krzywizny menisku. Podobne obliczenia zmiany wydajności jonizacji wraz z napięciem ekstrakcyjnym zaprezentowałem w [N17] (Al) oraz w [H14] (rys. 2. i 3. dla Eu)



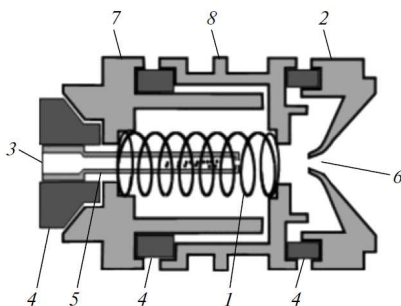
Rys. 36. Krzywe prądowo-napięciowe zmierzone eksperymentalnie i obliczone przy wykorzystaniu modelu numerycznego. (rys. 10 z [H11]).

Rezultaty obliczeń wykonanych przy wykorzystaniu przedstawionego powyżej modelu numerycznego sugerują, że drogą do zwiększenia wydajności jonizacji jest przede wszystkim zwiększenie gęstości elektronów w obszarze wyładowania, jak również wzrost temperatury wyładowania. W poprzednio omawianym rozwiązaniu wyładowanie paliło się w stosunkowo dużym obszarze między spiralnym włóknom katody o średnicy ~ 7 mm a powierzchnią cylindrycznej anody o wewnętrznej średnicy ~ 19 mm. Ponadto obszar wyładowania jest dość odległy od otworu ekstrakcyjnego, co może zmniejszać uzyskiwane natężenia prądów jonowych. W pracy [H10] (rys 3.) przedstawiłem rezultaty obliczeń numerycznych wydajności jonizacji In w pomniejszonej komorze jonizacji, w której gęstość n_e mogłaby sięgać do 10^{22} cm^{-2} . Teoretyczna wydajność jonizacji w tym przypadku sięga wartości bliskich 0.9 nawet dla kT_e rzędu 2 eV.

Celem dalszego zwiększenia wydajności zaproponowałem zastosowanie gruntownie przebudowanego źródła jonów z katodą wnąkową typu Sideniusa [85]. Przebudowa polegała na:

- umieszczeniu anody w przedniej części źródła, **co radykalnie zmniejsza odległość między obszarem wyładowania a otworem ekstrakcyjnym**
- umieszczeniu parownika wewnątrz wnąki katody, tak by był on ogrzewany przez włókno katody i wyładowanie
- uformowaniu anody na kształt lejka, co pozwala **zredukować obszar wyładowania do bezpośredniego sąsiedztwa otworu ekstrakcyjnego** jak również korzystnie wpływa na ekstrakcję wiązki.

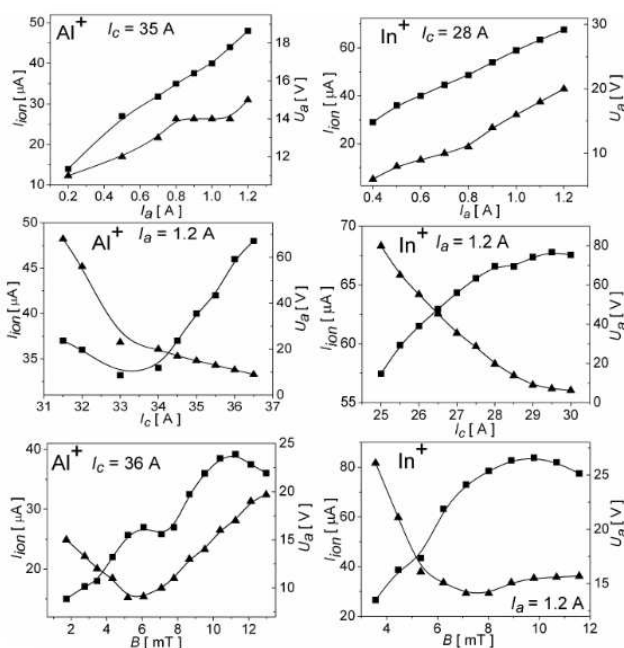
Konstrukcja źródła jonów zaprezentowana została w pracy [H10] na rys. 1., a porównać ją do wcześniejszych rozwiązań można korzystając z rys. 1. oraz 3. z [H7]. Wnęka katody ma wewnętrzną średnicę ~14 mm i długość 20 mm. Wykonana jest z dwu molibdenowych części rozdzielonych izolatorem z azotku boru. Wnęka mieści spiralne włókno katody, podobnie jak w poprzednim przypadku wykonane z drutu wolframowego o średnicy 0.75 mm. Włókno to grzane jest przepływem prądu o I_c zazwyczaj w zakresie 25-35 A. Molibdenowy parownik, osadzony w izolatorze (BN) umieszczony jest zazwyczaj wewnątrz katody wnękowej, jak na rysunku, możliwe jest także częściowe wysunięcie go poza wnękę w przypadku pracy z substancjami lotnymi lub o niskiej temperaturze topnienia (In, As, Sb). Wyładowanie łukowe podtrzymywane przez elektrony wytworzone w katodzie wnękowej pali się w niewielkim obszarze pomiędzy lejkowatą anodą a przednią częścią katody wnękowej. Konieczność stosowania zewnętrznego zasilacza anodowego z racji odwrotnej polaryzacji obudowy źródła stykającej się z anodą (patrz rys. 3. z [H7]) powoduje ograniczenie stosowanego natężenia prądu wyładowania do 1.2 A. Jak się jednak okazuje, jest to wartość wystarczająca do efektywnej pracy źródła jonów.



Rys. 37. Konstrukcja źródła jonów z katodą wnękową i parownikiem. 1 - spiralne włókno katody (W), 2 - anoda (Mo), 3 - doprowadzenie gazu roboczego (opcjonalne) 4 - izolatory (BN), 5 - parownik(Mo) 6 - otwór ekstrakcyjny, 7,8 - komora katody (Mo).

Podobnie jak w przypadku poprzedniej konstrukcji, komora źródła jonów umieszczona jest wewnątrz zewnętrznego elektromagnesu, którego pole magnetyczne ma za zadanie częściowe kompensowanie pola od włókna katody.

Źródło jonów testowane było przy wykorzystaniu identycznego jak poprzednio opisanego zestawu pomiarowego bazującego na implantatorze UNIMAS. Pomiary wykonywano dla $U_{ext}=25$ kV oraz $U_{acc}=75$ kV. Wyniki wstępne dla Al i In [P12] pokazane są na rys. 38., więcej charakterystyk uzyskanych dla stałych substancji roboczych można znaleźć w pracy [H10].



Rys. 38. Zależności natężenia prądu jonowego oraz napięcia anodowego od natężeń prądu wyładowania, grzania katody oraz indukcji pola magnetycznego zewnętrznego elektromagnesu. Wyniki dla Al oraz In [P12].

Analizując wspomniane wyżej charakterystyki można dojść do następujących wniosków:

- Natężenie prądów jonowych rośnie niemal liniowo ze wzrostem prądu wyładowania dla wszystkich badanych substancji (In, Al, Mn, Sb, Bi oraz As). Z powodu ograniczenia I_a do 1.2 A nie obserwowano w tym zakresie wysycenia charakterystyk.
- Wzrost I_a powoduje coraz silniejsze ogrzewanie parownika a zatem wzrost ciśnienia par substancji roboczej w komorze źródła, jak również wzrost gęstości elektronów w wyładowaniu. Podobnie jak w przypadku poprzedniej konstrukcji obserwowany jest spadek napięcia anodowego. jednakże dla substancji, dla których stosowane były stosunkowo niewielkie natężenia prądu grzania katody rzędu 25 A (In czy Sb) obserwowany był raczej wzrost U_a z I_a . Zachowanie krzywych $U_a(I_a)$ zależy od tego, która z przeciwnych tendencji okazuje się dominująca: wzrost napięcia wyładowania wraz z I_a , co jest typowe, gdy stosuje się gazową substancję roboczą [211], czy też spadek napięcia U_a spowodowany wzrostem ciśnienia par spowodowany silniejszym nagraniem parownika.
- Zmienny przebieg krzywych $I_{ion}(I_c)$ odzwierciedla, tak jak poprzednio, zmiany wydajności jonizacji związane z zależnością wartości przekroju czynnego na jonizację od energii elektronów. Szczególnie dobrze widoczne jest to w przypadku Mn i Bi. W przypadku Al i As udało się zarejestrować jedynie wznoszącą się część charakterystyk, jako że I_c ograniczone było do ~37 A. Warto pamiętać, że w przypadku omawianej konstrukcji parownik ogrzewany jest przede wszystkim przez spiralę katody. Zwiększanie I_c nie tylko zwiększa gęstości elektronów w wyładowaniu, ale w znacznym stopniu prowadzi do zwiększenia ciśnienia par jonizowanej substancji, co z kolei najczęściej skutkuje spadkiem napięcia wyładowania (patrz rys. 5b. w [H10]).
- W przypadku większości badanych substancji roboczych, tak gazowych (rys. 4. [P12]) jak i stałych (rys. 6. [H10]) optymalna wartość indukcji pola magnetycznego zewnętrznego elektromagnesu mieści się w zakresie 7-10 mT. Zazwyczaj obserwowany jest spadek napięcia wyładowania z rosnącym B .

Warto w tym miejscu wspomnieć, że źródło jonów z anoda z przodu wytwarza stosunkowo intensywne wiązki jonów molekularnych As_2^+ (35 μA) oraz Sb_2^+ (35 μA). Charakterystyki pracy źródła jonów można znaleźć w pracy [H10] na rysunku 7. Różnice między przebiegami krzywych $U_a(I_a)$ wynikające najprawdopodobniej z różnych lotności omawianych substancji można tłumaczyć w podobny sposób jak dla jonów pojedynczych.

Tabela 2. Zestawienie wydajności dwu opisywanych konstrukcji źródeł jonowych. Porównywane są dane uzyskane dla $I_a=1.1$ A

jon	I_{ion} [μA] (anoda cylindryczna)	I_{ion} [μA] (katoda wnekowa, anoda z przodu)
Al ⁺	25	50
Mn ⁺	35	60
In ⁺	50	80
As ⁺	20 ($I_a=2$ A)	50
Bi ⁺	70	35
Sb ⁺	30	35
He ⁺	15	80
Xe ⁺	20	55
Ar ⁺	40	110

Zaproponowałem też testowanie źródła pod kątem produkcji intensywnych wiązek jonów zawierających kilka atomów węgla, co mogłoby mieć zastosowanie do syntezy cienkich warstw diamentopodobnych, węglików, bądź modyfikacji własności trybologicznych. Stwierdzono, że przy zastosowaniu butanu jako substancji roboczej można otrzymać około 80 μA jonów o masie 30 j.m.a. (najprawdopodobniej $C_2H_6^+$ [212]).

Podsumowując, zaprezentowana konstrukcja źródła jonów z katodą wnąkową i parownikiem pozwala uzyskiwać wiązki jonów o znacznym natężeniu zarówno dla pierwiastków występujących zazwyczaj w postaci gazowej jak i stałej. Optymalne wartości uzyskanych natężeń prądów jonowych zawarte są w Tabeli 2., przy czym należy pamiętać, że porównywana jest w niej wydajność dla $I_a=1.1$ A. Godne uwagi jest, że konstrukcja z katodą wnąkową jest około dwukrotnie bardziej wydajna w porównaniu ze źródłem jonów z anodą cylindryczną i parownikiem. W przypadku gazów szlachetnych przewaga tej konstrukcji jest jeszcze bardziej wyraźna. Zaproponowana przeze mnie konstrukcja umożliwia naświetlenia jonami o dawce 10^{16} - 10^{17} cm⁻² w trakcie pojedynczego cyklu pracy. Przykładowo: w przypadku standardowej próbki o średnicy 2 cali i prądu wiązki jonowej o natężeniu 50 μA, strumień naświetlania jest rzędu 10^{13} cm⁻² s⁻¹ (przy założeniu 50 % procent strat związanych z przemiataniem wiązki). Jak nietrudno obliczyć, naświetlanie o dawce 10^{17} cm⁻² wymaga 10^4 s.

Jony wielokrotnie naładowane wykorzystywane są w rozmaitych dziedzinach badań: umożliwiają m. in. efektywne wytwarzanie nanostruktur na powierzchniach bombardowanych ciał stałych [213-215], pozwalają uzyskiwać duże współczynniki rozpylania powierzchni [216], wykorzystuje się je do modyfikacji powierzchni metali [217] i polimerów [218]. Jony podwójnie naładowane (i w wyższych stanach ładunkowych) stosowane są także w procesie implantacji jonowej [219, 220] – energia n -krotnie naładowanego jonu wynosi $E_n = nUe$, gdzie e – ładunek elementarny, a U – napięcie przyspieszające w implantatorze. Wykorzystanie jonów wielokrotnie naładowanych jest więc najprostszą, nie wymagającą żadnych zmian konstrukcyjnych metodą zwiększenia zasięgu implantacji.

Najczęściej stosowanymi źródłami jonów wykorzystywanymi do produkcji jonów w wyższych stanach ładunkowych są: źródła jonów wykorzystujące elektronowy rezonans cyklotronowy (ECR) [221,222], źródła bazujące na wiązkach elektronowych [223] bądź laserowych [224], a także na wyładowaniu łukowym (MEVVA) [189,225]. Także i zaproponowane przeze mnie konstrukcje pozwalają otrzymywać wiązki jonów podwójnych a także, w niewielkim stopniu, potrójnych. W przypadku źródła jonów z anodą cylindryczną obserwowałem wiązki Al²⁺ (15 μA), Al³⁺ (2.5 μA) jak również As²⁺ (6 μA), As³⁺ (1.5 μA). Zależności uzyskiwanych natężeń od napięcia anodowego można znaleźć na rys. 8. w [H11]. Jak należałoby się spodziewać z przebiegów przekrojów czynnych na jonizację, intensywność wiązek jonów w wyższych stanach ładunkowych rośnie wraz z U_a . W przypadku źródła z katodą wnąkową na wczesnym etapie badań obserwowałem wiązki jonów Bi²⁺ (15 μA), As²⁺ (8 μA) czy He²⁺ (3 μA). Stosowne charakterystyki można znaleźć na rys. 8 w [H10]. Wydajność tych źródeł jest na tyle duża, że postanowiłem badaniom wytwarzania jonów podwójnych poświęcić dwie prace [H5] i [H9].

W pracy [H9] zaprezentowałem charakterystyki źródła z cylindryczną anodą i parownikiem zmierzone dla jonów podwójnie naładowanych. Celem pomiarów było sprawdzenia jego osiągnięć źródła i określenia optymalnych parametrów pracy. Jako substancje robocze wybrałem Al, As, Sb, Te, Bi, Ga, oraz Mn. Podobne badania dla źródła z katodą wnąkową i parownikiem przedstawiłem w pracy [H5]. Tym razem badanymi substancjami były: Al, Bi, As, Ge, Kr oraz Xe. Charakterystyki zaprezentowane są na rys. 1 i 2. [H9] oraz 2. i 3. w [H5]. Oto niektóre wnioski wynikające z analizy tych zależności:

- podobnie jak w przypadku produkcji jonów pojedynczych prąd jonowy szybko rośnie z I_a . Wzrost ten często hamowany jest przez spadek napięcia wyładowania. Tak jak i w poprzednio omawianych przypadkach mamy tu do czynienia z dwoma przeciwstawnymi tendencjami: wzrostem napięcia wyładowania wraz ze wzrostem natężenia prądu wyładowania (co ma miejsce przy stałym ciśnieniu gazu roboczego) oraz spadkiem napięcia U_a spowodowanym wzrostem ciśnienia par na skutek intensywniejszego ogrzewania parownika. Pierwsza tendencja dominuje dla Al i Sb, druga dla Te, Bi i Ga. W przypadku As obserwuje się współzawodnictwo między oboma tendencjami

- bardzo podobne zachowanie obserwowane jest w przypadku źródła z katodą wnąkową i parownikiem (rys. 2. i 3. w [H5]). Spadek U_a z natężeniem prądu wyładowania obserwowany jest dla Al i In, przeciwna tendencja natomiast dla Bi. Współzawodnictwo obydwu trendów widoczne jest dla Ge.
- najintensywniejsza produkcja jonów podwójnych obserwowana jest dla niewielkich wartości prądu żarzenia katody. Wynika to z faktu, że przekroje czynne na powstanie jonów podwójnych mają zarówno progi jak i maksima dla znacznie wyższych energii niż odpowiednie przekroje dla jonów pojedynczych. Optymalne wartości napięcia wyładowania U_a w rozpatrywanych przypadkach to 90-150 V.
- podobnie wysokie wartości U_a wymagane są w przypadku źródła z katodą wnąkową. Godne uwagi jest, że w przypadku tej konstrukcji dużo łatwiej jest osiągać duże wartości napięcia wyładowania - wystarczy zwiększyć dystans między anodą i katodą przez zwiększenie grubości pierścieniowego izolatora między tymi dwiema elektrodami.
- zależność $I_{ion}(B)$ ma postać szerokiego wierzchołka z maksimum w 8-10 mT. Napięcie anodowe zazwyczaj spada z B , jednakże dla Al i Te [H9] obserwowana jest przeciwna tendencja, co może mieć związek z niewielkimi wartościami natężenia prądu płynącego przez włókno katody. W przypadku źródła z katodą wnąkową wierzchołki są szersze i przesunięte w stronę niższych wartości B , co może mieć związek z nieco innym położeniem spirali katody względem obszaru wyładowania.

Podsumowując: obydwa źródła umożliwiają dość efektywną produkcję jonów podwójnych. Uzyskane natężenia prądów jonowych zebrałem w Tabeli 3. Wydajność źródeł pozwala m.in. na wykonywanie naświetlań o umiarkowanych dozach ($\sim 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) z energiami do $\sim 550 \text{ keV}$ bez wprowadzania zmian konstrukcyjnych w implantatorze UNIMAS. Widoczna jest pewna przewaga źródła z katodą wnąkową (np. przypadek Bi i As), która wynika ze wspomnianej wcześniej łatwości utrzymania dużych wartości napięcia wyładowania.

Tabela 3. Natężenia uzyskanych prądów jonów podwójnych dla dwu omawianych typów źródeł jonów.

jon	$I_{ion} [\mu\text{A}]$ (cyl. anoda)	jon	$I_{ion} [\mu\text{A}]$ (kat. wnąkowa)
Al^{2+}	15	Al^{2+}	10
As^{2+}	6	As^{2+}	10
Bi^{2+}	6	Bi^{2+}	15
Ga^{2+}	6	Ge^{2+}	5
Sb^{2+}	3	In^{2+}	5
Te^{2+}	1	Kr^{2+}	8
Mn^{2+}	1	Xe^{2+}	8

W celu lepszego zrozumienia i opisanie produkcji jonów podwójnych opracowałem numeryczny model produkcji tych jonów w omawianych źródłach jonów. Uwzględni on procesy powstawania jonów pojedynczych i podwójnych (łącznie w procesie jonizacji bezpośredniej i schodkowej) poprzez zderzenia z elektronami w oparciu o tablice przekrojów czynnych zamieszczone w [226]. Celem uproszczenia przyjąłem, że komora jonizacyjna jest sferyczna (promień R_{ion}) z otworem ekstrakcyjnym o promieniu R_{ext} . Kolejne uproszczenie polega na rozbiciu całego procesu na n_s etapów, przy czym liczbę tą oszacowałem jako stosunek powierzchni komory do powierzchni otworu ekstrakcyjnego, i należy ją rozumieć jako średnią liczbę przelotów atomu od ścianki do ścianki we wnące. Na i -tym etapie, w trakcie którego atomy przebywają drogę λ rzędu rozmiarów komory, powstaje N_i^{1+} jonów pojedynczych oraz N_i^{2+} jonów podwójnych, przy czym $N_i^{1+} = P^{1+} N_i^0$ oraz $N_i^{2+} = P^{2+} N_i^0$, gdzie N_i^0 oznacza liczbę niezjonizowanych atomów. Prawdopodobieństwa jonizacji po przebyciu drogi λ szacowane są wzorami:

$$P^{1+} = 1 - \exp(-\lambda/\lambda^{1+}) \quad \text{oraz} \quad P^{2+} = 1 - \exp(-\lambda/\lambda^{2+}). \quad (46)$$

Średnią drogę swobodną ze względu na jonizację do stanu q można obliczyć korzystając ze wzoru:

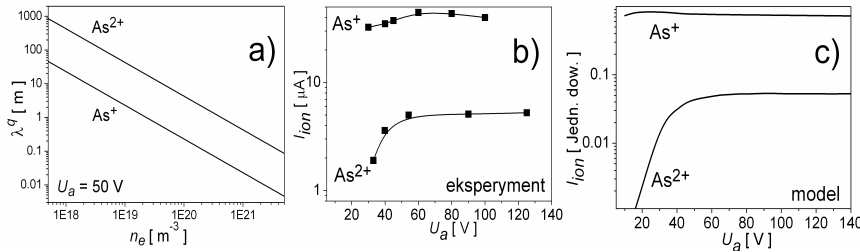
$$(\lambda^q)^{-1} = n_e \langle \sigma^q(E) f(E) \rangle \quad (47)$$

gdzie n_e jest gęstością elektronów, $\sigma^q(E)$ to przekrój czynny na jonizację do stanu q , $f(E)$ to rozkład Maxwella elektronów względem ich energii, uwzględniający prędkość unoszenia wynikająca z napięcia U_a , zaś nawiasy oznaczają konwolucję tych funkcji. Rysunek 39. przedstawia wyniki obliczeń średnich dróg dla jonów arsenu dla $U_a=50$ V w źródle z anoda cylindryczną. Widać, że λ^{2+} jest o około rząd wielkości większa od λ^{1+} jednak dla dostatecznie dużych n_e i ona staje się porównywalna z rozmiarami komory jonizacyjnej.

Prawdopodobieństwa ekstrakcji jonów można oszacować jako $P_e^{1+} = P_e^{2+} = P_e^0$ gdzie P_e^0 to stosunek powierzchni otworu ekstrakcyjnego do powierzchni komory jonizacyjnej. Liczbę jonów pojedynczych i podwójnych ekstrahowanych w i -tym kroku możemy oszacować jako:

$$E_i^{1+} = P_e^{1+} (N_i^{1+} + R_i^{1+}) \text{ oraz } E_i^{2+} = P_e^{2+} (N_i^{2+} + R_i^{2+}), \quad (48)$$

przy czym R_i^q oznacza liczbę jonów w stanie q , które nie opuściły źródła w poprzednich etapach. Sumując E_i^{1+} i E_i^{2+} po wszystkich etapach i dzieląc przez początkową liczbę atomów N^0 uzyskuje się względne natężenia ekstrahowanych prądów jonowych dla jonów w obu stanach ładunkowych. Wyniki obliczeń zależności I_{ion} od napięcia anodowego dla arsenu przedstawiono na rys. 39c. Widać narastanie I_{ion} wraz z napięciem anodowym, aż do około 60 V, kiedy następuje wysycenie tego wzrostu. Godne uwagi jest, że **opracowany przeze mnie model pozwolił na osiągnięcie dobrej zgodność przebiegów $I_{ion}(U_a)$ z wynikami eksperymentalnymi.**



Rys. 39. Średnie drogi swobodne ze względu na jonizację pojedynczą i podwójną dla As (a) oraz zależności $I_{ion}(U_a)$ zmierzone eksperymentalnie (b) i przewidywane przez model (c).

Podobne obliczenia przeprowadziłem także dla źródła jonów z katodą wnękową, cechującego się znacznie mniejszym obszarem wyładowania. Rozpatrywałem jonizację atomów bizmutu [H5]. W tym przypadku średnie drogi λ^{2+} są o około rząd wielkości dłuższe niż λ^{1+} , niemniej jednak dla $n_e=10^{21}$ m⁻³ mogą być rzędu 10 cm, co zapewni już znaczącą produkcję jonów podwójnych. Zależności $I_{ion}(U_a)$ otrzymane dzięki opracowanemu przeze mnie modelowi, jak i zmierzone eksperymentalnie zamieszczone są na rysunku 4 w [H5]. Kolejny raz widoczna jest dobra zgodność przewidywań modelu z danymi eksperymentalnymi.

E. Podsumowanie

W trakcie badań opisanych w pracach składających się na wskazany przeze mnie cykl osiągnąłem szereg rezultatów. Poniżej wymieniam, moim zdaniem, najistotniejsze z nich.

- Opracowałem pierwszy program numeryczny umożliwiający samozgodne modelowanie źródła jonów ujemnych metodą Particle-In-Cell. Program ten umożliwia zadawanie takich parametrów jak skład plazmy, jej gęstość i temperatura a także geometria i potencjały elektrod. Program uwzględnia także wpływ statycznego pola magnetycznego na trajektorie cząstek. Program umożliwia śledzenie trajektorii cząstek, rejestrowanie rozkładów potencjału i gęstości poszczególnych składników plazmy, natężeń prądów ekstrahowanych wiązek i ich profili, rozkładów energii deponowanej przez cząsteczki uderzające w przeszkody itp. [H24,H25]. Elastyczność programu pozwala na modelowanie także urządzeń innych typów niż źródła jonów ujemnych, dla opisu których był tworzony - z powodzeniem wykorzystałem go do modelowania plazmy w źródle jonów dodatnich z katodą wnękową [H26]. Ponieważ program oferuje różne schematy „generowania” cząstek można z niego korzystać jak z klasycznego programu do modelowania

biegu wiązki jonowej (*ion gun code*) - co pozwoliło np. prześledzić bieg wiązki jonów w analizatorze energii spektrometru SIMS i odtworzyć widmo jonów wtórnych wybijanych z bombardowanej tarczy. Przygotowałem także zrównolegloną wersję tego programu umożliwiającą efektywne korzystanie z komputerów wieloprocessorowych. Zaproponowałem i testowałem strategię hybrydowego zrównoleglenia programów numerycznych bazujących na metodzie Particle-In-Cell z jednoczesnym wykorzystaniem wielu procesów (w oparciu o np. środowisko MPI) oraz wątków (z wykorzystaniem OpenMP) co zaowocowało znacznym wzrostem wydajności obliczeniowej programu [H20].

- Zbadałem wpływ poprzecznego pola magnetycznego w obszarze siatki ekstrakcyjnej na natężenie wiązki elektronów ekstrahowanych wraz z jonami H⁺. Stwierdziłem, że pole filtrujące o indukcji rzędu 25 mT zmniejsza natężenie wiązki elektronowej do poziomu 1% natężenia wiązki uzyskiwanej bez zastosowania filtra, przy czym pole filtrujące w istotny sposób nie wpływa na natężenie ekstrahowanej wiązki jonów H⁺ [H24]. Jednoczesne stosowanie poprzecznego pola filtrującego i powstrzymującego o indukcji rzędu kilku mT (w obszarze komory) redukuje poziom natężenia ekstrahowanego prądu elektronów do poziomu porównywalnego z natężeniem wiązki jonów H⁺, co jest zgodne z wynikami eksperymentalnymi. Po raz pierwszy [H25, H21,H16] używając trójwymiarowego modelowania PIC potwierdziłem obserwowany w doświadczeniu [44] efekt zwiększania natężenia ekstrahowanej wiązki jonów ujemnych przez słabe (rzędu kilku mT) poprzeczne pole magnetyczne w komorze plazmowej (tzw. pole powstrzymujące). Podobne rezultaty dawały obliczenia z wykorzystaniem programów o niższej wymiarowości, jak i późniejsze obliczenia z użyciem modeli 3D przeprowadzone przez inne grupy [45-47,74-76]. Przeprowadziłem także badania parametryczne dla dwu różnych konfiguracji siatek ekstrakcyjnych testowanych dla potrzeb źródła jonów ujemnych konstruowanego w IPP Garching (m.in. zależności natężenia prądu wiązki H⁺ od indukcji i szerokości profilu poprzecznego pola magnetycznego [H21], oraz krzywe prądowo napięciowe [H16]). Obliczenia uwzględniały dyfuzję elektronów w poprzecznym polu magnetycznym spowodowaną zderzeniami z innymi składnikami plazmy.
- Korzystając z opracowanego modelu bazującego na metodzie PIC przeprowadziłem obliczenia numeryczne dla plazmowych źródeł jonów (w tym źródeł katodą wnekową) odtwarzając m.in. przebieg krzywej prądowo-napięciowej zgodny z charakterystyką zmierzoną eksperymentalnie [H26], obserwując stabilizowanie się potencjału w komorze plazmy na skutek ekranującego działania plazmy [H17,H18] czy też ewolucję menisku plazmy wraz z napięciem ekstrakcyjnym [H17,H20]. Analizując wyniki eksperymentalnych pomiarów charakterystyk prądowo-napięciowych oraz wyniki obliczeń numerycznych zaproponowałem wprowadzenie pojęcia perweancji dynamicznej, pojęcia analogicznego do oporu dynamicznego. Wielkość ta jest adekwatna do opisu charakterystyk prądowo-napięciowych w przypadku gdy odbiegają one od skalowania $I \sim U^{3/2}$, przewidywanego przez prawo Childa-Langmuira dla przepływów ograniczanych przez ładunek przestrzenny. Uzyskane przeze mnie na drodze modelowania numerycznego zależności perweancji dynamicznej od napięcia ekstrakcyjnego są podobne do zależności zmierzonych eksperymentalnie [H17,H23]. Zaproponowałem wprowadzenie pojęcia powierzchni efektywnej (bądź ekwiwalentnej) którą można interpretować jako powierzchnię elektrody w układzie zastępczym z płaskimi elektrodami. Korzystając z tak redefiniowanej powierzchni można przyjąć, że prawo Childa-Langmuira w postaci lokalnej (dla przyrostów) jest dla układu zastępczego zachowane w każdym punkcie charakterystyki prądowo-napięciowej [H17].
- Zaproponowałem nową metodę szacowania temperatury jonowej w komorze plazmowego źródła jonów z wykorzystaniem eksperymentalnych charakterystyk prądowo-napięciowych oraz numerycznych obliczeń rozbieżności wiązki [H23].
- Opracowałem rozbudowany model numerycznego źródła jonów z gorącą wneką [H1,H4,H6,H18,H19], dostosowany w szczególności dla konfiguracji w której jonizator jest jednocześnie naświetlaną tarczą - tego typu konfiguracja nigdy dotąd nie doczekała się modelu numerycznego. Model ten uwzględnia zarówno jonizację powierzchniową , jak i umożliwia uwzględnienie jonizacji przez zderzenia z elektronami. Model

bierze też pod uwagę takie zjawiska jak dyfuzja wytworzonych nuklidów w materiale tarczy, opóźnienia w emisji jonów wynikające z efuzji cząstek wzdłuż wnęki jonizatora czy rozpad promieniotwórczy wytworzonych nuklidów. Napisany przeze mnie program numeryczny umożliwia prześledzenie zależności wydajności jonizacji od takich czynników jak rodzaj materiału jonizatora i temperatura wnęki, geometria wnęki i układu ekstrakcji, napięcie ekstrakcyjne, obecność dodatkowego pola wewnątrz wnęki, okres półrozpadu nuklidu czy skale czasowe charakteryzujące procesy efuzji i dyfuzji. Opracowany przeze mnie program może wspierać analizowanie wyników pomiarów np. krzywych uwalniania, czy pomiarów typu *hold-up*, umożliwiając odtwarzanie mierzonych krzywych w zależności od np. poszukiwanych parametrów opisujących proces dyfuzji lub efuzji (np. średnia liczba zderzeń, średni czas przylegania itp.)

- Uzyskałem dobrą zgodność przewidywań modelu numerycznego z wynikami pomiarów w przypadku zależności wydajności jonizacji od potencjału jonizacji substancji wprowadzonej do wnęki [H6]; napięcia ekstrakcyjnego [H6], temperatury jonizatora w przypadku izotopów stabilnych [H6] i promieniotwórczych [H1] czy czasu połowicznego rozpadu [H1]. Posługując się wspomnianym modelem numerycznym zaproponowałem nową konstrukcję źródła jonów z gorącą wnęką [H12]. Niemal w pełni sferyczna wnoka z niewielkim otworem pozwalałaby na uzyskiwanie wydajności jonizacji o ~40 % większej niż spotykane w literaturze rozwiązania z wnęką półsferyczną. Wykorzystując modelowanie numeryczne potwierdziłem możliwości zachodzenia jonizacji przez zderzenia z elektronami w źródłach bazujących na jonizacji powierzchniowej [H15]. Zjawisko takie było obserwowane eksperymentalnie [141]. Wykazałem, że w szczególnych przypadkach wkład od jonizacji elektronami może przewyższać wkład od jonizacji powierzchniowej dla izotopów stabilnych [H15], jak i promieniotwórczych [H2].
- Wziąłem udział w opracowaniu analitycznych modeli pozwalających na szacowanie wydajności jonizacji źródła z gorącą wnęką [H22]. Przewidywania jednego modelu są w bardzo dobrej zgodności [H14] z wynikami obliczeń w oparciu o wzór zaproponowany przez R. Kirchnera [139], jak również z wynikami obliczeń opracowanego przeze mnie modelu numerycznego. Wspomniane wyżej modele analityczne uzupełnione zostały przeze mnie o poprawki uwzględniające straty wynikające z rozpadu promieniotwórczego [H1], co pozwoliło uzyskać dobrą zgodność modeli: numerycznego i analitycznego w przypadku opisu nuklidów promieniotwórczych.
- Zaproponowałem dwie nowe konstrukcje źródeł jonów z wewnętrznym parownikiem [H7,H10,H11,H14], tj. źródła jonów z anodą cylindryczną oraz z katodą wnękową a następnie kierowałem ich budowę, optymalizację i badaniami charakterystyk. Rozwiązanie, polegające na ogrzewaniu parownika przez wyładowanie łukowe i gorącą katodę umożliwiło wytwarzanie intensywnych wiązek jonów szerokiej gamy pierwiastków przy użyciu kompaktowego źródła jonów o mocy około 350-400 W. Wydajności wspomnianych konstrukcji są często wyższe niż porównywalnych pod względem mocy i rozmiarów rozwiązań renomowanych producentów (np. SO-55 firmy HighVoltage Eng.). Opracowałem też metodę sterowania temperaturą parownika przez dobór jego wielkości i umiejscowienia w źródle tak, by był on ogrzewany stosownie do lotności czy temperatury topnienia substancji roboczej. Zaproponowałem model matematyczny opisujący ogrzewanie parownika, pozwalający na szacowanie względnych przyrostów jego temperatury.
- Opracowałem model numeryczny jonizacji w plazmowych źródłach jonów, umożliwiającego szacowanie średnich dróg swobodnych atomów ze względu na jonizację jak również zależności wydajności jonizacji od temperatury i gęstości plazmy w komorze źródła, napięcia ekstrakcyjnego, geometrii elektrod itp. czynników opisujących układ [H10,H11,H14]. Uzyskane przy pomocy modelu zależności, jak np. krzywe prądowo-napięciowe są w dobrej zgodności z wynikami pomiarów eksperymentalnych [H10]. Opracowałem też zrównolegloną wersję programu numerycznego umożliwiającego wydajniejsze modelowanie [H18]. Zaproponowałem także numeryczny model powstawania jonów podwójnych w plazmowych źródłach jonów z parownikiem pozwalający na szacowanie wydajności powstawania jonów jednokrotnie i dwukrotnie naładowanych w oparciu o zadane zależności przekrojów czynnych na jonizację od energii elektronów.

Przewidywane przez ten model względne wydajności produkcji jonów pojedynczych i podwójnych w funkcji napięcia anodowego są w dobrej zgodności z wynikami eksperymentów [H5,H9].

- Opracowałem i doskonaliłem szereg metod wytwarzania wiązek jonów, w tym pierwiastków ciał stałych, co wymagało m.in. badania charakterystyk źródeł jonów dla kilkudziesięciu substancji celem oszacowania optymalnych parametrów pracy. Możliwości naświetleń m.in. jonami As^+ , In^+ , P^+ itp. o dawkach znacznie przekraczających 10^{16} cm^{-2} oferowane przez opisane rozwiązania zaowocowały m.in. wytworzeniem niezwykle interesujących nanostruktur związków $\text{A}_{\text{III}}\text{B}_{\text{V}}$ zintegrowanych z podłożami $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ typowymi dla technologii krzemowej [P1,P4,P5,P7,P8,N7,P11,N9]. Opanowanie przez zespół w którym pracuję metody wytwarzania intensywnych i stabilnych wiązek Al^+ [N17] pozwoliło nam przyczynić się m.in. do wytworzenia pierwszych polskich urządzeń mikroelektronicznych bazujących na węglu krzemu [N18,N22]. Opracowałem też dwie nowe metody wytwarzania wiązek jonów pierwiastków ziem rzadkich w oparciu o tzw. wewnętrzną syntezę z wykorzystaniem a) chlorków ziem rzadkich [H14] b) tlenków ziem rzadkich i par CCl_4 . Wydajność zaproponowanych metod jest w wielu przypadkach lepsza niż dla innych metod opisywanych w literaturze. Kolejną zaproponowaną i z powodzeniem testowaną metodą otrzymywania wiązek jonowych było wytwarzanie intensywnej wiązki jonów Mo^+ z wykorzystaniem par chloropochodnych metanu (CCl_4 i CHCl_3) [H3].

6. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych

A. Przed uzyskaniem stopnia doktora

W roku akademickim 1993/1994 rozpocząłem studia na Wydziale Matematyki i Fizyki UMCS w Lublinie na kierunku fizyka. Jako specjalizację wybrałem fizykę teoretyczną. W 1996 roku, będąc studentem trzeciego roku, zostałem zachęcony przez prof. Piotra Rozmeja do zainteresowania się tematyką dynamiki paczek falowych. Konstrukcje te, będące dobrze zlokalizowanymi w przestrzeni superpozycjami wielu stanów własnych hamiltonianu kwantowego, uważane są za pomost umożliwiający przejście między opisem kwantowym a klasycznym. Szczególnie interesującym przypadkiem są tzw. stany koherentne [227,228], wprowadzone dla potencjału oscylatora harmonicznego już przez Schrodingera [229]. Charakteryzują się one tym, iż (a) minimalizują zasadę nieoznaczoności, (b) są stanami własnymi operatora anihilacji, (c) odpowiadające im paczki falowe poruszają się identycznie jak cząstki klasyczne, nie zmieniając ponadto swego kształtu. Podjęto wiele prób wprowadzenia uogólnionych stanów koherentnych [230-232] dla różnych hamiltonianów, jednakże stany koherentne oscylatora harmonicznego (kanoniczne stany koherentne) są jedynymi które jednocześnie charakteryzują się wszystkimi trzema wymienionymi wyżej właściwościami.

Poważną trudnością w interpretowaniu paczek falowych jako ogniwa spajającego opis kwantowy (mikroskopowy) a klasyczny (makroskopowy) jest ich rozplywanie się w trakcie ewolucji. Paczka falowa staje się zazwyczaj coraz słabiej zlokalizowana, mimo iż jej zachowanie zbliżone jest do okresowego (ze skalą czasową równą okresowi klasycznego odpowiednika). Rozplywanie to jest konsekwencją faktu, że odległości między sąsiednimi poziomami energetycznymi układu nie są jednakowe - wyjątkiem jest tu oczywiście hamiltonian oscylatora harmonicznego. Moja praca magisterska pt. „*Poza twierdzenie Ehrenfesta - ewolucja czasowa stanów koherentnych w prostych układach fizycznych*” wykonana pod kierunkiem prof. dra hab. Andrzeja Góździa (w związku z licznymi w tym czasie wyjazdami zagranicznymi prof. Rozmeja) poświęcona była opisowi i analizie ewolucji paczek w falowych dla czasów znacznie dłuższych niż tzw. okres klasyczny - skala czasowa związana ze średnimi odległościami między sąsiednimi energiami składników paczki. Rozpatrywałem paczki falowe w układach takich jak nieskończona studnia potencjału, atom wodoropodobny, rotator płaski czy bąk kwantowy. Zakładałem zazwyczaj gaussowski rozkład współczynników obsadzenia poziomów wokół stosunkowo dużej wartości głównej liczby kwantowej, co w znacznym stopniu przypomina schemat obsadzenia w paczkach wzbudzanych krótkimi impulsami laserowymi w atomach [233-236]. Badałem

też ewolucję paczek falowych wzbudzanych przez zderzenia kulombowskie z jądrami atomowymi, których schemat rozmieszczenia poziomów energetycznych przypomina drabinkę $I(I+1)$, typową dla bąka kwantowego. Współczynniki obsadzenia poszczególnych poziomów dla tego przypadku obliczałem wykorzystując program GOSIA [237 - współczesna wersja programu], autorstwa T. Czosnyki. Ewolucja pakietów falowych badałem wykorzystując tzw. funkcję autokorelacji (rzut paczki falowej na jej stan początkowy), jak również wizualizując kwadraty modułu funkcji falowej, wprawiając się w umiejętności programowania i przeprowadzania obliczeń numerycznych. We wszystkich przypadkach obserwowany był podobny schemat ewolucji paczki: po kilku cyklach początkowo przypominających zachowujących zachowanie klasycznej cząstki/układu, paczka traciła swój kształt i rozpływała się. To co, można było zaobserwować później, w niczym nie przypominało zachowania obiektu klasycznego: w niektórych momentach dochodziło do tzw. ułamkowych odbudów paczki falowej - pojawiały się jej zwielokrotnione kopie (klony) nadal ewoluujące jak cząstki klasyczne i po pewnym czasie ulegających także rozpląnięciu. Pełna odbudowa pojedynczego pakietu zachodziła po czasie porównywalnym z nową skalą czasową, zwaną okresem odbudowy. Jak należało się spodziewać, kwaziklasyczna ewolucja odbudowanego pakietu trwała jedynie przez krótki czas i kończyła się jego rozpląnięciem. Matematyczny opis odbudów pełnych i ułamkowych podany został przez Averbukha i Perelmana [239,240] - odbudowy zachodzą w momentach będących ułamkami okresu odbudowy, a liczba klonów zależy od relacji licznika i mianownika tego ułamka. W układach, w których energia była proporcjonalna co najwyżej do kwadratu liczby kwantowej, ewolucja paczki falowej była w pełni okresowa, a skalą czasową był okres odbudowy. Jednakże w bardziej złożonym przypadku jakim jest atom wodoru, obserwowałem tzw. superodbudowy pełne i ułamkowe paczki falowej, związane ze skalą czasową pochodzącą od kolejnego członu rozwinięcia faz składowych paczki falowej w szereg Taylora wokół wartości średniej głównej liczby kwantowej [240,241].

Mnogość wspomnianych wyżej zjawisk i skal czasowych oraz zachęta ze strony prof. Piotra Rozmeja skłoniła mnie do zajęcia się w swojej rozprawie doktorskiej wpływem spinowego stopnia swobody na ewolucję paczek falowych. Zjawiska kolapsu i odbudowy spinu, jak i wpływ tego dodatkowego stopnia swobody na dynamikę paczki opisane były dotychczas w układzie opisanym hamiltonianem nierelatywistycznym z dodanym członem spinowo-orbitalnym [242,243]. Nowe, zastosowane przeze mnie podejście, polegające na zastosowaniu formalizmu relatywistycznego (wykorzystywanego do tamtej pory raczej do opisu atomów oddziałujących z silnymi polami elektromagnetycznymi) do badania swobodnego atomu miało tą zaletę, że istnienie spinowego stopnia swobody uwzględniane było automatycznie. Badałem paczki falowe w dwu układach: tzw. oscylatorze Diraca [244,245], traktowanym jako przypadek modelowy - ułatwiający wyizolowanie i analizę nowych zjawisk oraz w relatywistycznym atomie wodoropodobnym. Paczki falowe zostały skonstruowane ze stanów własnych rozpatrywanych hamiltonianów w ten sposób, że były dobrze zlokalizowane zaś kierunek spinu był dobrze określony.

Oryginalnymi rezultatami zaprezentowanymi w rozprawie były:

- Opisanie relatywistycznego wahadła spinowo-orbitalnego w oscylatorze Diraca, polegającego na przemiennych kolapsach i odbudowach spinu. Zasadniczą różnicą w stosunku do swego nierelatywistycznego odpowiednika jest zaburzona okresowość, wynikająca z nieliniowości widma energetycznego. Kolejną różnicą jest występowanie szybkich oscylacji (Zitterbewegung) wartości średnich operatorów spinu, co jest konsekwencją domieszki stanów o ujemnych energiach w paczce falowej. Zjawisko to zanika przy przejściu do reprezentacji Foldy-Wouthuysena.
- Wykazanie zachodzenia pełnych i ułamkowych odbudów spinu w trakcie długofalowej ewolucji paczek falowych w oscylatorze Diraca. Schemat tych zjawisk jest zgodny z ogólnym scenariuszem Averbukha i Perelmana.
- Prześledzenie nietypowej ewolucji tzw. liniowych paczek falowych w potencjale oscylatora Diraca. Przekształcają się one w struktury o kształcie pierścienia, odzyskując potem swój pierwotny zlokalizowany

kształt. Obserwacja składowych pochodzących od składników o ujemnej energii, propagujących w kierunku przeciwnym do reszty paczki.

- Otrzymanie wzorów opisujących czasową ewolucję wartości średnich operatorów spinu, położenia i pędu paczek falowych w oscylatorze Diraca zarówno w reprezentacji Diraca jak i Foldy-Wouthuysena. Warto zauważyć jest, że nadzwyczaj silne sprzężenie spinowo-orbitalne w rozpatrywanym układzie powoduje, że wartości średnie ewoluują zupełnie inaczej niż w przypadku odpowiednika nierelatywistycznego - znaczną rolę odgrywają w nich składowe o częstościach dwukrotnie większych niż okres klasyczny.
- Konstrukcja nowego typu paczki falowej w atomie wodoropodobnym: tzw. paczki keplerowskiej, poruszającej się wzdłuż klasycznej orbity eliptycznej. Paczka ta początkowo zachowuje swój kształt, po czym ulega rozplynięciu a następnie można obserwować jej odbudowy wedle scenariusza Averbukha i Perelmana, wzbogaconego o zjawiska wynikające z istnienia spinowego stopnia swobody.
- Wyprowadzenie wzorów opisujących ewolucję wartości średnich operatorów spinu dla czterech typów paczek falowych w atomie wodoropodobnym: kołowych, eliptycznych, keplerowskich i radialnych. Uwzględnienie członów dominujących w analizie tych wzorów prowadzi do konkluzji, że we wszystkich tych przypadkach obserwowana jest precesja wektora spinu.
- Opisanie zjawiska wahadła spinowo-orbitalnego w relatywistycznym atomie wodoropodobnym, polegającego, jak w poprzednio wspomnianych przypadkach na przemiennych kolapsach i odbudowach wektora spinu. Wykazanie wpływu spinowego stopnia swobody na przestrzenną ewolucję paczek falowych.
- Podanie wzorów opisujących nową skalę czasową (okres spinowo-orbitalny) dla paczek eliptycznych, kołowych i radialnych, charakteryzującą dynamikę tych paczek dla długich czasów ewolucji. Szczególnie godnym uwagi wydaje się być fakt, że okres spinowo-orbitalny dla paczki radialnej może być krótszy niż okres odbudowy. Oznacza to że, ten typ paczek może być dobrym kandydatem do doświadczalnego badania wpływu spinowego stopnia swobody na jej ewolucję.
- Wykazanie zbieżności okresu precesji orbity eliptycznej w atomie wodoropodobnym z okresem precesji spinu (wspomnianym wyżej okresem spinowo-orbitalnym). Podanie wzoru na precesję orbity paczki keplerowskiej.

Warto w tym miejscu podkreślić, że niektóre zjawiska przewidywane przez obliczenia prezentowane w mojej rozprawie doktorskiej, jak np. precesja orbity po której odbywa się ruch paczki falowej w atomie wodoropodobnym, zostały zaobserwowane eksperymentalnie [246,247].

B. Po uzyskaniu stopnia doktora

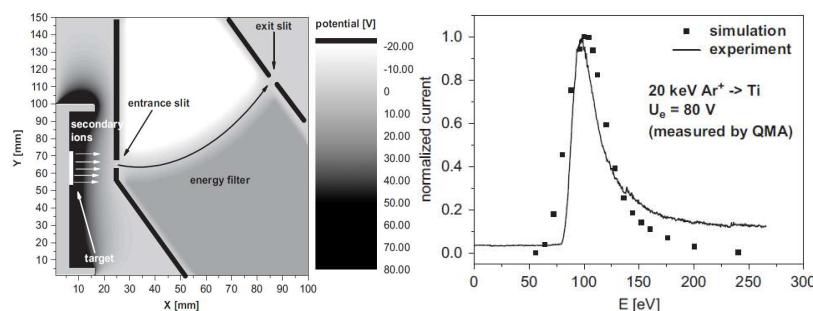
W 2003 roku podjąłem pracę na stanowisku adiunkta w Zakładzie Fizyki Jonów i Implantacji, co wiązało się ze zmianą obszaru prowadzonych przeze mnie badań. Główną tematyką było modelowanie numeryczne źródeł jonowych, badania procesów w nich zachodzących oraz doskonalenie ich konstrukcji. Starałem się także aktywnie włączać w inne nurty badań prowadzonych w Zakładzie. Wziąłem m.in. udział w konstruowaniu i uruchomieniu unikalnego urządzenia do badania procesów rozpylania i wtórnej emisji jonowej przy wykorzystaniu wiązek jonów pierwotnych o energii do ok. 60 keV. Nawet pobieżny przegląd literatury na temat współczynników rozpylania typowych kombinacji pocisk-tarcza prowadzi do konkluzji, że często brak jest danych eksperymentalnych dla zakresu 10-50 keV. Wynika to z faktu, że mimo iż spektrometry jonów wtórnych (SIMS) są wykorzystywane w licznych laboratoriach, to typowe energie wiązki jonów pierwotnych są rzędu kilku kiloelektronowoltów. Z drugiej strony, typowe energie wiązki jonów pierwotnych wykorzystywane w implantatorach są rzędu 100 keV i więcej. Aby zapłacić tę lukę skonstruowano przyrząd przypominający, jeśli chodzi zasadę działania, spektrometr mas jonów wtórnych, ale bazujący na elektromagnetycznym separatorze jonów dostarczającym wiązek niemal dowolnych jonów pierwotnych (co jest trudne do osiągnięcia w typowych spektrometrach SIMS) o energiach w zakresie od kilku do ok. 60 keV. Zasadnicza część układu pomiarowego znajduje się w komorze próżniowej dołączonej do separatora i składa się z: układu diafragm

formujących wiązkę jonową, uchwytu badanej próbki umieszczonego w puszcze Faradaya, analizatora energii jonów wtórnych oraz kwadropolowego analizatora mas. Szczegółowy opis konstrukcji można znaleźć w pracy [P18]. Urządzenie sterowane jest przez oprogramowanie modułowe, którego poszczególne składniki umożliwiają strojenie parametrów takich jak np. napięcie przyspieszające jony wtórne, napięcie ogniskowania wiązki pierwotnej, czy napięcie między okładkami analizatora energii, jak również wykonanie zasadniczych pomiarów, takich jak zbieranie widma masowego lub energetycznego jonów wtórnych oraz pomiarów zależności zmian współczynnika wtórnej emisji jonów w funkcji dawki naświetlania.

Oprócz wkładu w konstruowaniu opisanego urządzenia (ze szczególnym uwzględnieniem sekcji analizatora energii i koncepcji modułu pomiaru ewolucji współczynnika wtórnej emisji jonowej) wziąłem udział w szeregu eksperymentów [P14,P17,P18], między innymi:

- pomiary rozkładów energii jonów wtórnych Al^+ wybitych z tarczy Al jonami gazów szlachetnych o energii 40 keV
- pomiary widm masowych jonów wtórnych wybitych z tarcz C, Si, Al bombardowanych jonami Ar^+ i Kr^+ o energii 40 keV. W przypadku tarcz wykonanych z materiałów niskiej czystości (Al, Si) oprócz jonów macierzystych tarczy obserwowano też jony domieszek (m.in. Na i K). W przypadku naświetlania jonami Ar^+ obserwowany był też wierzchołek pochodzący od tych jonów (zaimplantowanych we wcześniejszej fazie procesu) co pozwala mieć nadzieję na obserwację oscylacji współczynników rozpylania w układzie ciężki pocisk - lekka tarcza [248,249]. W przypadku, gdy tarcze naświetlano jonami Kr^+ wierzchołki od jonów wtórnych kryptonu nie były obserwowane (prawdopodobnie z racji krótszego czasu naświetlania tarczy)
- pomiary rozkładów energii jonów wtórnych wybitych z tarcz Si oraz Ti wiązkami jonów Ar^+ o energii 20-30 keV. Pomiary te wykonano dla różnych wartości napięć przyspieszających jony wtórne. Obserwowano zarówno przesunięcie jak i poszerzenie widma wraz ze wzrostem wspomnianego napięcia przyspieszającego. Zdecydowanie silniejszy efekt wzrostu natężenia prądu rejestrowanego po przejściu przez analizator energii obserwowany był dla próbki Ti. Różnice mogą być spowodowane bardziej złożoną strukturą widma masowego tytanu (widma energetyczne zbierane były dla wszystkich jonów wybitych z tarczy). Przeprowadzone pomiary umożliwiły wyznaczenie zależności maksymalnego natężenia prądu jonów wtórnych od napięcia przyspieszającego [P14].
- wyznaczeniu współczynników wtórnej emisji jonowej dla tarcz Ti i Si naświetlanych Ar^+ o energiach w zakresie 20-30 keV. Współczynniki te mieszczą się, odpowiednio, w zakresach 0.24-0.26 oraz 0.030-0.033 [P14].
- pomiary widm masowych jonów wtórnych z wybitych z tarcz Si oraz Ti wiązkami jonów Ar^+ o energii 20-30 keV. Pomiary widm przeprowadzono dla różnych wartości napięcia przyspieszającego jony wtórne, co pozwoliło na taki jego dobór (70-100 V), który zapewnia optymalną rozdzielczość.
- pomiary widm energetycznych elektronów wtórnych z wybitych z tarcz Si oraz Ti wiązkami jonów Ar^+ o energii 20-30 keV. Zaobserwowano elektrony wybite nie tylko przez wiązkę pierwotną, lecz także elektrony wybijane przez jony wtórne uderzające w elementy analizatora energii, co przejawiało się obecnością długich „ogonów” w widmach energetycznych.

Przeprowadziłem także numeryczne modelowania biegu jonów wtórnych przez filtr energii przy wykorzystaniu procedur programu TRQR w celu zbadania wpływu geometrii osłon stolika na uzyskiwane widma energetyczne. Geometria i potencjały elektrod w obszarze tarczy i filtra została dokładnie odtworzone. Schemat modelowanego układu i obliczony rozkład potencjału został pokazany na rysunku 40. Założyłem, że jony wtórne są emitowane z kołowego obszaru o powierzchni identycznej z rozmiarami obszaru rzeczywiście naświetlanego przez wiązkę pierwotną. Rozkłady energii jonów wtórnych zostały obliczone przez prof. J. Sielanko z wykorzystaniem programu SATVAL [250-252].



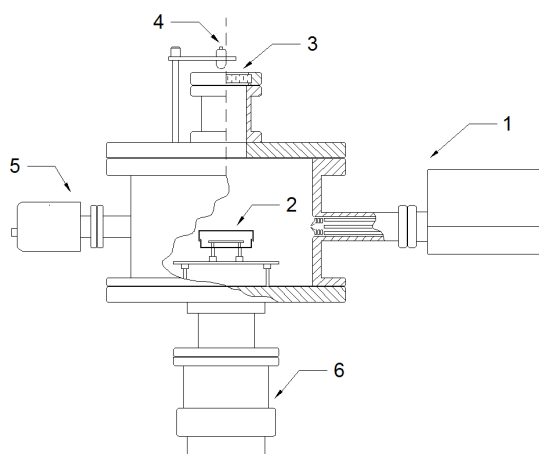
Rys.40. Rozkład potencjału w analizatorze energii spektrometru SIMS (po lewej) oraz eksperymentalne i obliczone (model numeryczny) widma energii jonów wtórnych (po prawej).

Obliczenia biegu cząstek wykonałem dla różnych wartości napięć między elektrodami filtra energii. Porównanie widm energetycznego jonów wtórnych Ti^+ wybitych przez wiązkę jonów Ar^+ uzyskanych na drodze obliczeń numerycznych i eksperymentu przedstawione jest na rys. 40. Widać dobrą zbieżność przewidywań uzyskanych w czasie projektowania aparatury z wynikami pomiarów. Przesunięcie wierzchołków widm o około 4 eV wynika z wpływu niejednorodności pola elektrostatycznego wywołanych osłonami stolika (co nie jest uwzględniane przy cechowaniu filtra energii) i znika, gdy przeprowadza się modelowanie dla stolika płaskiego.

Pomiary termodesorpcji gazów szlachetnych

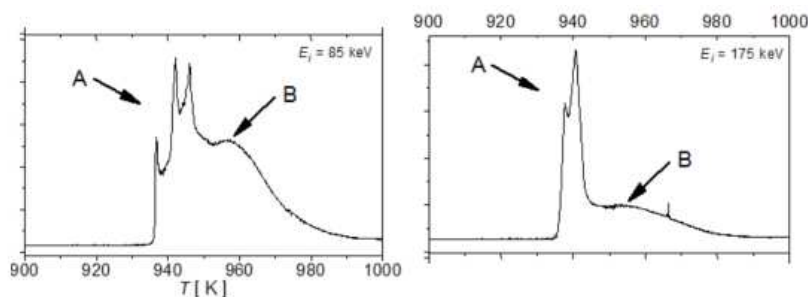
Wykorzystanie implantacji gazów szlachetnych, w szczególności He, w połączeniu z pomiarami termodesorpcji wprowadzonej domieszki jest jedną z popularnych metod umożliwiających badanie procesu formowania się defektów i wnęk w podstawowym dla elektroniki materiale jakim jest krzem [253-257].

Aby móc prowadzić tego typu badania, począwszy od 2012 r. wziąłem udział w konstruowaniu i uruchomieniu spektrometru termodesorpcyjnego w Zakładzie Fizyki Jonów i Implantacji Instytutu Fizyki UMCS. Realizacja tego projektu była możliwa między innymi dzięki finansowaniu uzyskanemu w ramach grantu Pełnomocnego Przedstawiciela Rządu Rzeczypospolitej Polski przy ZIBJ w Dubnej. Spektrometr termodesorpcyjny, którego uproszczony schemat pokazany jest na rysunku 41., bazuje na kwadrupolowym spektrometrze masowym QMG220 firmy Pfeiffer Vacuum.



Rys. 41. Schemat spektrometru TDS 1 - kwadrupolowy spektrometr mas, 2 - grzejnik połączony ze stolikiem na próbkę 3 - okienko kwarcowe, 4 - głowica pirometru, 5 - głowica próżniomierza, 6 - pompa turbomolekularna.

Spektrometr ten może być wykorzystywany m.in. do badania dynamiki uwalniania uprzednio wprowadzonych do tarcz domieszek wraz ze wzrostem temperatury. W latach 2013/2014 wziąłem udział w badaniach m.in. procesu termodesorpcję argonu z próbek krzemowych implantowanych jonami Ar^+ o energiach w zakresie 85-115 keV. Wyniki tych badań zostały niedawno w pracy [P2]. Zaobserwowano obecność dwóch typów emisji argonu: wąskich wierzchołków obserwowanych dla nieco niższych temperatur oraz szerokich pasm występujących dla wyższych temperatur, które odpowiadają emisji argonu powoli dyfundującego z objętości próbki.



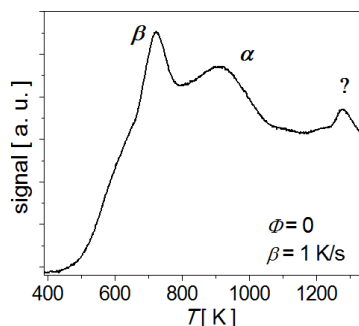
Rys.42. Widma TDS
zaimplantowanego Ar uwalnianego
z próbek Si.

Wąskie wierzchołki są natomiast skutkiem nagłego uwalniania Ar z aglomeratów/bąbli tworzących się w krzemie w związku z gwałtownym wzrostem ciśnienia wewnątrz powstałej wnęki. Co istotne, zauważyłem zamianę kolejności obserwowanych wierzchołków w stosunku do wyników pomiarów otrzymanych wcześniej w innych ośrodkach dla znacznie niższych energii implantacji (<60 keV [258]). Jest to najprawdopodobniej skutkiem znacznej różnicy między średnim zasięgiem implantacji, a więc głębokością, na jakiej koncentracja argonu jest największa (czyli głębokością, z której dyfunduje największa ilość atomów) a głębokością, na jakiej mamy do czynienia z maksymalną koncentracją defektów, gdzie można spodziewać się szczególnie częstego powstawania wnęk na skutek agregacji defektów.

Uzyskane wyniki pozwoliły mi oszacować także energie aktywacji desorpcji argonu uwalnianego poprzez dyfuzję (drugi ze wspomnianych wyżej wierzchołków) przy użyciu metody Redheada [259]: wyniosły one 2 eV dla energii implantacji 85 keV oraz 1.75 dla energii 115 keV.

We wspomnianych wcześniej artykułach [253-257] badano wpływ temperatury implantacji jak i wygrzewania poimplantacyjnego, jak również innych czynników jak np. dodatkowa implantacja jonami wodoru na uwalnianie He. W większości przypadków widmo TDS zawiera dwa wierzchołki pochodzące od He: jeden (α) będący rezultatem uwalniania gazu zgromadzonego we wnękach, oraz drugi (β), będący owocem dyfuzji atomów zajmujących położenia międzywęzłowe lub wakanse. Warto mieć na uwadze, że dotychczas stosowano albo stosunkowo niskie (poniżej 20 keV) albo bardzo duże (rzędu 1 MeV) energie implantacji. Aby uzupełnić tę lukę, zaproponowałem podjęcie badań dla energii implantacji rzędu 100 keV. Celowe wydawało się także zbadanie wpływu uprzedniego zdefektowania próbki Si na zmiany w otrzymywanych widmach termodesorpcyjnych. Próbki krzemowe zostały zdefektowane przez pre-implantację jonami Si^+ (tak aby nie wprowadzać obcych domieszek do matrycy krzemowej, a jedynie wprowadzić defekty do obszaru implantowanego). Dawki pre-implantacji mieściły się w zakresie 10^{14} - 10^{16} jonów/cm². Energia pre-implantacji była ograniczona przez parametry techniczne dostępnego implantatora i wynosiła ok. 260 keV, tak aby zakresy pre-implantacji jak i implantacji helem w miarę możliwości się pokrywały. Aby sprostać temu zadaniu implantację jonami He^+ o energii 90 keV wykonano do próbek nachylonych pod kątem 45 stopni.

Zaproponowałem przeprowadzanie szeregu pomiarów widm TDS z różnymi prędkościami narastania temperatury, w zakresie od 0.1 do 1 K/s. Celem wyznaczenia energii aktywacji desorpcji w funkcji dawki pre-implantacji, przeprowadziłem analizę przesunięcia wierzchołków β wedle wspomnianej wcześniej metody Redheada. Wartość energii aktywacji zmieniała się w zakresie od 0.97 eV dla próbek nie pre-implantowanych (dobra zgodność z danymi literaturowymi [253,256]) do 1.3 eV dla dawki pre-implantacji równej 10^{16} jonów Si^+ na cm². Podobna analiza dla wierzchołka α była niemożliwa gdyż ten typ emisji nie był obserwowany dla pre-implantacji o wyższych dawkach (10^{16} cm⁻²), ponadto położenie wierzchołka zmienia się na tyle szybko ze zmianą tempa narastania temperatury próbki, że dla mniejszych wartości tego parametru oba wierzchołki się nakładają. Co ciekawsze, widma TDS zebrane dla większych prędkości narastania sugerują, moim zdaniem, że emisja α składa się z dwu wierzchołków, pochodzących być może od dwu różnych typów wnęk. Obecność trzeciego wierzchołka w omawianych widmach TDS nie była opisana, jak dotąd, w literaturze, zapewne na skutek stosowania większego tempa grzania próbek (~2-5 K/s) i węższego zakresu temperatur. Planuję dalsze badanie tego typu emisji w przyszłości.

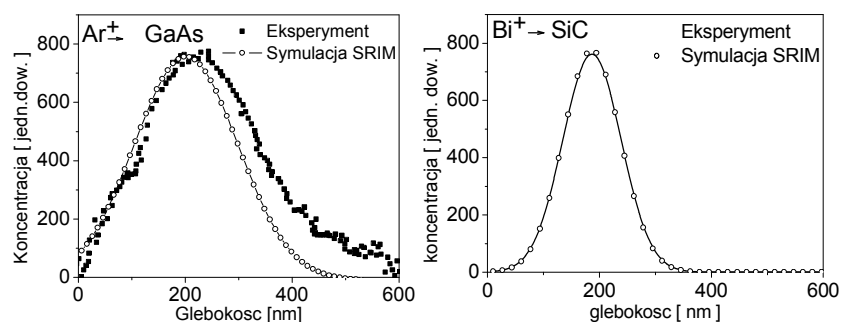


Rys.43. Widmo termodesorpcyjne He uwalnianego z próbki krzemowej. Widoczny trzeci wierzchołek (γ).

Badania jonoluminescencji i spektrometria PIPE

W związku z realizacją w Zakładzie Fizyki Jonów i Implantacji części Projektu Badawczego Zamawianego PBZ-MEiN-6/2/2006 wziąłem udział w projektowaniu i uruchomieniu stanowiska do badania emisji światła z ciał stałych (przede wszystkim z węgla krzemu) wzbudzonego przez bombardowanie wiązką jonów o energii rzędu 100-200 keV. W zależności od tego czy rejestrowane jest świecenie pochodzące z naświetlanego ciała, czy też wzbudzonych cząstek rozpylonych z tarczy, mówi się obserwacji jonoluminescencji (IL- IonoLuminescence [260-265]), bądź emisji fotonów wywołanych naświetlaniem strumieniem cząstek (PIPE - Particle Induced Photon Emission [267]). Jako źródło wiązki pierwotnej w omawianym stanowisku wykorzystano implantator UNIMAS, zaś zasadniczym urządzeniem pomiarowym jest fotopowielacz sprzężony z monochromatorem. Szczegółowy opis konstrukcji można znaleźć w pracach [N3,N10].

Aparatura ta została wykorzystana do opracowania metody pomiarów rozkładów głębokościowych zaimplantowanych domieszek przez pomiar zmian intensywności świecenia charakterystycznych linii domieszki i głębokości krateru. Głębokość utworzonego krateru wyznacza się z dokładnością ~ 5 nm wykorzystując profilometr firmy Talysurf. Znając średnice i głębokość krateru oraz dawkę jonów bombardujących można także w łatwy sposób wyznaczyć współczynnik rozpylania materiału z którego wykonano tarczę. Analizowane w pracy [N10] tarcze z krystalicznego GaAs i SiC zostały zaimplantowane dawką $2,2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ jonów Al^+ o energii 170 keV. Do analizy próbki GaAs wykorzystano wiązkę jonów Ar^+ o energii 120 keV i gęstości prądu jonowego $25 \mu\text{A/cm}^2$. Próbkę z SiC rozpylano wiązką jonów Bi^+ , także o energii 120 keV i gęstości prądu jonowego $25 \mu\text{A/cm}^2$. Wyznaczone głębokości wytrawionych kraterów (dla GaAs – 906 nm, a dla SiC – 560nm) posłużyły mi do wyskalowania rozkładów głębokościowych zaimplantowanej w próbkach domieszki Al^+ . Uzyskane eksperymentalnie rozkłady przedstawia rys. 44., na którym zamieszczono również rozkłady uzyskane na drodze modelowania numerycznego programem SRIM 2010. Z porównania średnich zasięgów eksperymentalnych R_{pd} i teoretycznych R_{pt} wynika, że ich różnica nie przekracza 10% (GaAs - $R_{pd}=220$ nm, $R_{pt}=203$ nm; SiC $R_{pd}=196$ nm, $R_{pt}=189$ nm).

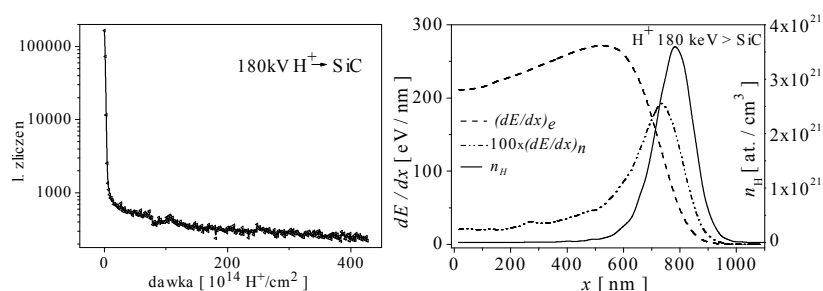


Rys. 44. Rozkłady głębokościowe domieszki (Al) w GaAs i SiC wyznaczone metodą PIPE oraz przez modelowanie numeryczne..

Przy wykorzystaniu opisanej powyżej aparatury wziąłem również udział w badaniu jonoluminescencji węgla krzemu bombardowanego protonami [N3]. Tarcze wykonane z węgla krzemu SiC (polityp 4H) naświetlaną wytworzoną w implantatorze wiązką protonów o energiach 120 i 180 keV. Otrzymane widma IL

mają charakter ciągły dla obu energii protonów i są superpozycją co najmniej trzech składowych, z których najsilniejsza posiada maksimum przy ok. 730 nm (1,7 eV). Pochodzenie pasma przy 650 nm jest prawdopodobnie związane z centrum defektowym w tlenku krzemu [268,269] pokrywającym SiC.

Kolejny eksperyment przeprowadzono w celu określenia wpływu amorfizacji krystalicznych tarcz wywołanej naświetlaniem na intensywność jonoluminescencji, jak było to obserwowane w [270]. Rejestrowano liczbę fotonów odpowiadających określonej długości fali (570 nm). Już po naświetlaniu trwającym 30 s wiązką protonową, odpowiadającym dawce $4 \cdot 10^{14} \text{ H}^+ \text{ cm}^{-2}$, natężenie IL ulega zmniejszeniu o około 2 rzędy wielkości, po czym jego wartość dalej spada, ale już w znacznie wolniejszym tempie (rys. 45). Zachowanie takie może świadczyć o wygaszaniu luminescencji po wprowadzeniu do kryształu pewnej liczby centrów rekombinacji bezpromienistej. Defektowanie półprzewodników towarzyszące implantacji jonowej prawie zawsze prowadzi do osłabienia wydajności rekombinacji promienistej elektron – dziura. Dodatkowo zachodzi jeszcze inny proces – wzrostu absorpcji światła w uszkodzonej radiacyjnie warstwie przypowierzchniowej próbki [271]. Podstawowym mechanizmem odpowiedzialnym za powyższe efekty są zderzenia elastyczne wnikającego do kryształu jonu z jądrami atomów tarczy, które wyrazić można liczbowo poprzez straty energii jonu na jednostkę długości jego toru. W przypadku SiC bombardowanego protonami, jak wynika z rozkładów strat energii (elektronowych i jądrowych) obliczonych przeze mnie z wykorzystaniem programu SUSPRE [272], są one bardzo małe w porównaniu ze stratami energii jonu na hamowanie elektronowe, czyli przede wszystkim na jonizację (rys. 45).



Rys. 45. Zależność sygnału IL z SiC od dawki implantacji (po lewej) oraz straty energii i rozkład domieszki obliczone programami SUSPRE oraz SRIM (po prawej).

Unikalną właściwością SiC jest wielka podatność na uszkodzenia radiacyjne, nawet dla bardzo lekkich pocisków takich jak protony. W przypadku badań prezentowanych w pracy [N3] wkład hamowania elektronowego jest dominujący, co przekłada się na bardzo znaczący wzrost współczynnika ekstynkcji światła w rozpatrywanym obszarze spektralnym. Absorpcja promieniowania jonoluminescencji generowanej w próbce SiC jest tak silna w zamorfizowanej warstwie przypowierzchniowej, że obserwowany był znaczący spadek rejestrowanego detektorem natężenia jonoluminescencji.

Wytworzenie diody p-i-n na bazie węgla krzemu

Dużym zainteresowaniem w ostatnim czasie cieszy się wytwarzanie elementów mikroelektronicznych dużej mocy w oparciu o implantowany węgiel krzemu, charakteryzujący się szeroką (ok. 3.2 eV) przerwą energetyczną oraz wysoką temperaturą topnienia (2830 °C). Do wytworzenia warstwy *p* stosuje się domieszkowanie jonami B lub Al, obszary typu *n* wytwarza się najczęściej implantując do podkładki z SiC azot lub fosfor. Użycie boru jako domieszki stwarza duże problemy, zwłaszcza na etapie wygrzewania ze względu na niski stopień aktywacji (0.1% dla 1700°C) oraz bardzo dużą redyfuzję w trakcie wygrzewania. Natomiast korzystne jest zastosowanie jako domieszki akceptorowej glinu, który w podsieci węgla ma ujemną energię wiązania (-7,9 eV) co powoduje, że korzystniejsze energetycznie jest obsadzenie przez atomy glinu położeń węglowych w sieci Si. Glin ma bardzo niską energię jonizacji domieszki (~0,2 eV). W związku z tym bardziej celowe, choć technicznie trudniejsze jest implantowanie węgla krzemu jonami Al jako głównej domieszki akceptorowej. Wiąże się to z koniecznością zastosowania źródła jonowego wytwarzającego wiązkę jonów Al^+ o

odpowiednio wysokim i stabilnym w czasie natężeniu prądu. Źródło jonów spełniające te wymogi jak i metoda wytwarzania wiązki jonów Al została opisana przeze mnie m.in. w pracach [H11,H14,P13].

W ramach prac nad realizacją Projektu Badawczego Zamawianego PBZ-MEiN-6/2/2006 wziąłem udział wspólnie z naukowcami z Politechniki Warszawskiej (grupa prof. Jana Szmidta) w wytwarzaniu pierwszych w Polsce elementów elektronicznych na bazie SiC. Uczestniczyłem w planowaniu i wykonaniu kilka implantacji Al⁺ do dwóch politypów SiC (6H i 15R). W trakcie implantacji próbka utrzymywana była w temperaturze 500°C. Implantację wykonano pięcioma różnymi dawkami przy różnych energiach, dla uzyskania odpowiedniego rozkładu domieszek. Energie i dawki implantacji były w tym przypadku następujące: (250 keV, $8,35 \cdot 10^{15}$ ion/cm²), (170 keV, $3,43 \cdot 10^{15}$ ion/cm²), (120 keV, $2,04 \cdot 10^{15}$ ion/cm²), (100 keV, $4,29 \cdot 10^{14}$ ion/cm²), (80 keV, $1,19 \cdot 10^{14}$ ion/cm²). Badania ramanowskie i elipsometryczne [N21] wykazały istnienie znacznych uszkodzeń radiacyjnych w próbce i powstanie warstwy amorficznej przy jej powierzchni. Konieczne było zatem obniżenie dawki implantacji o około rząd wielkości. Dla osiągnięcia równomiernego rozkładu koncentracji domieszki na zakładanym poziomie 2×10^{19} cm⁻³ do głębokości około 0,5 μm, wziąłem udział w wykonaniu 4 kolejnych procesów implantacji jonowej do próbek 4H-SiC w temperaturze 500 °C stosując następujące energie i dawki: 250 keV – $3,7 \cdot 10^{14}$ cm⁻²; 160 keV – $1,7 \cdot 10^{14}$ cm⁻²; 100 keV – $1,0 \cdot 10^{14}$ cm⁻²; 55 keV – $6,5 \cdot 10^{13}$ cm⁻². Próbkę wygrzewano w temperaturze 1600°C celem odbudowy struktury krystalicznej. Kolejnym krokiem w celu uzyskania działającej diody było wykonanie kontaktów omowych [273], umożliwiających podłączenie powstałych złącz do źródła zasilania.

Przeprowadzone pomiary charakterystyk prądowo-napięciowych pokazują, że udało się wytworzyć przewidywane złącze p-i-n. Wytworzone diody p-i-n charakteryzowały się napięciem przebicia 550-600 V przy dobrym uzysku na poziomie 85% [N18]. Niepożądanym zjawiskiem jest stosunkowo duży prąd upływu utrzymujący się na stałym poziomie 10 μA w szerokim zakresie napięcia polaryzacji zaporowej (50 – 400 V).

Modyfikacja własności półprzewodników metodą implantacji jonowej

Od lat w różnych ośrodkach naukowych na świecie duży nacisk kładzie się na opracowanie wydajnych źródeł światła bazujących na krzemie, które można by wytwarzać w technologii CMOS. Bardzo obiecującym kandydatem na źródła światła wytwarzane w technologii krzemowej są struktury metal-tlenek-krzem – MOSLED zawierające atomy ziem rzadkich [274], german lub nanokrystality krzemowe [275,276]. Podstawowym problemem który stoi na drodze do powszechnego stosowania struktur MOSLED jako źródeł światła jest ich względnie krótka żywotność (kilkaset godzin). Za zniszczenie diody odpowiedzialne jest głównie pułapkowanie ładunku w trakcie wzbudzania elektroluminescencji oraz generacja defektów przez wysokoenergetyczne elektrony. Dlatego też w celu wydłużenia czasu pracy diod MOSLED konieczne jest zredukowanie przynajmniej początkowej koncentracji defektów w dwutlenku krzemu. Jedną z metod prowadzącą do redukcji liczby defektów w tlenku jest implantacja lekkich jonów (H, N, O) do w pełni przygotowanych struktur MOSLED w dawce nie przekraczającej $5 \cdot 10^{13}$ jon/cm² i o energii zapewniającej przejście jonu przez warstwę tlenku. W latach 2008-2009 włączyłem się w badania nad tą tematyką prowadzone w Zakładzie Fizyki Jonów i Implantacji IF UMCS, uczestnicząc m.in. w projektowaniu i wykonaniu licznych implantacji jonowych. W rezultacie tych badań wykazano, że implantacja tlenu do struktur MOSLED zawierających Ge w dawce $5 \cdot 10^{12}$ cm⁻² lub wodoru w dawce dziesięciokrotnie większej prowadzi do pięciokrotnego wzrostu wydajności świecenia w porównaniu z diodami nie implantowanymi. Dodatkowo zaobserwowano czterokrotne zmniejszenie liczby defektów NBOHC (zerwanych wiązań między atomami tlenu) i dwukrotne centrów E'. W przypadku koimplantacji azotu odnotowano dwukrotny wzrost wydajności świecenia z Ge i redukcję koncentracji defektów NBOHC o 25%. Również w przypadku próbek zawierających atomy ziem rzadkich dodatkowa implantacja N zwiększa stabilność ich pracy po przez redukcję liczby wakansów tlenowych ODC i centrów E' (odpowiednio trzy- i czterokrotnie). Wspomniane powyżej rezultaty opublikowano w pracy [P16].

Innymi godnymi uwagi strukturami, które mogą znaleźć zastosowanie w nowych źródłach światła są nanoklastry krzemowe (Si-nc) umieszczone w matrycy SiO₂ [277]. Kwantowy efekt rozmiarowy tłumaczy ich zdolność do emitowania promieniowania z szerokiego zakresu - od zieleni aż do podczerwieni. Nanoklastry krzemowe mogą także wzmacniać emisję promieniowania z jonów ziem rzadkich, jak np. Er³⁺ [278]. W ramach badań prowadzonych wspólnie z naukowcami z Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (obecnie Helmholtzzentrum Dresden) zaobserwowano wzmocnienie natężenia elektroluminescencji linii 460 nm oraz 550 nm na skutek implantacji jonami gadolinu. Wspomniane linie emisyjne pochodzą od wakansów tlenowych (ODC) i nanoklastrów krzemowych o średnicy rzędu 1 nm. Czterokrotne wzmocnienie emisji na skutek implantacji jest rezultatem transferu energii z jonów Gd³⁺ do wspomnianych obiektów. Ponadto stwierdzono, że dodatkowa implantacja gadolinem zwiększa koncentrację pożądaných nanoklastrów Si. Wyniki wspomnianych badań opublikowano w pracy [P6].

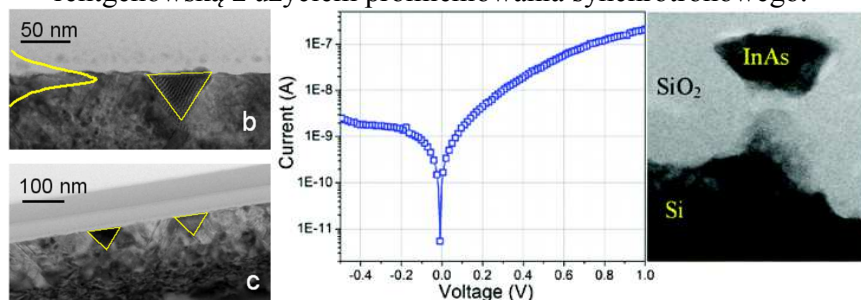
Wytwarzanie nanostruktur półprzewodnikowych z wykorzystaniem implantacji jonowej

Miniaturyzacja urządzeń elektronicznych, będąca jednym z zasadniczych podejść mających na celu zwiększanie mocy mikroprocesorów dociera współcześnie do granicy 10 nm. Kolejnym ograniczeniem wydajności jest stosunkowo niska ruchliwość nośników. Półprzewodniki złożone A_{III}B_V charakteryzujące się ruchliwością elektronów od kilku (InP-5400 cm²/Vs) do kilkudziesięciu (InSb-77000 cm²/Vs) razy większą niż w krzemie wydają się być idealnym kandydatem. Na drodze do szerokiego zastosowania półprzewodników A_{III}B_V stoi brak metod ich efektywnej integracji z technologią krzemową. To właśnie problemom integracji półprzewodników tego typu z materiałami stosowanymi w technologii krzemowej poświęcony był projekt NN 515 246637 *Badania własności optycznych i elektrycznych struktur MOSLED zawierających nanokropki kwantowe związków półprzewodnikowych A_{III}B_V lub A_{II}B_{VI} oraz ziemie rzadkie*, w którego realizacji wziąłem aktywny udział. Badania nad tą tematyką kontynuowane były także po zakończeniu realizacji projektu. Prowadzone były one we współpracy z grupą naukowców z Helmholtzzentrum Dresden a ich owoce zaprezentowane zostały w cyklu prac [P1,P4,P5,P7,P8,N7,P9,P11,N9]. Dwoma zasadniczymi technikami użytymi do wytworzenia nanostruktur były: implantacja jonowa oraz wygrzewanie milisekundowe (FLA - Flash Lamp Annealing). Aby możliwe stało się formowanie nanostruktur półprzewodnikowych na drodze rekrytalizacji z fazy ciekłej konieczne jest (oprócz odpowiedniego reżimu wygrzewania) zapewnienie odpowiedniej koncentracji domieszek (na poziomie kilku procentów). Wiąże się to z koniecznością wykonywania implantacji jonowych o dawkach rzędu 5·10¹⁶ cm⁻² jonami szerokiej gamy pierwiastków (In, As, P, Ga itp.). Biorąc pod uwagę rozmiar i liczbę próbek potrzebnych do sprawdzenia skuteczności różnych trybów wygrzewania, aby realizacja zadania badawczego była możliwa w rozsądnym czasie, należy dysponować źródłem jonów dostarczającym możliwie stabilnej czasowo wiązki o natężeniu prądu pożądanego jonu rzędu 50-100 μA, co przekłada się na 1-2 dni robocze implantacji pojedynczego pierwiastka przy dawce rzędu 3·10¹⁶ cm⁻². W trakcie realizacji wspomnianych wyżej badań byłem odpowiedzialny za opracowanie metod uzyskiwania wiązek jonowych o natężeniu wystarczającym do realizacji projektu (co doskonale współgrało z prowadzoną przeze mnie tematyką dotyczącą rozwoju konstrukcji wydajnych źródeł jonów pierwiastków z ciał stałych). Oceniam, że zastosowanie źródła jonów z cylindryczną anodą i wewnętrznym parownikiem skróciło czas implantacji ponad dziesięciokrotnie, w praktyce umożliwiając realizację założonych badań.

Nowatorska metoda wytwarzania nanostruktur (w stosunku takich jak osadzanie z fazy gazowej, synteza zol-żel, napyłanie wyładowaniem o częstotliwości radiowej itp. [279-283]) umożliwiła:

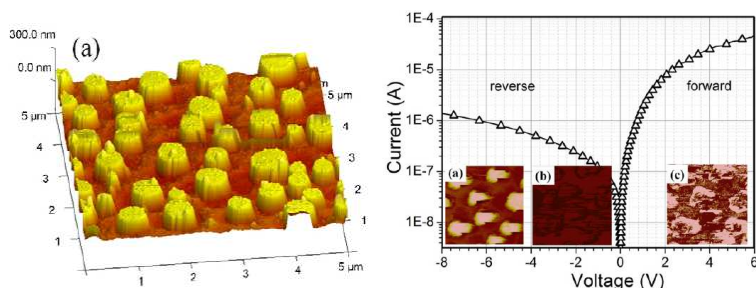
- wytworzenie nanokropek InAs o średnim rozmiarze 7.5 nm w matrycy krzemowej [P11]. Istnienie nanokropek zostało potwierdzone przez wysokorozdzielczą transmisyjną mikroskopię elektronową. Krystaliczny charakter wytrąceń InAs potwierdzony został przez mikroskopię ramanowską. Zarejestrowano także widma fotoluminescencji pochodzącej od kropek InAs.

- Wytworzenie nanopiramidek InAs o średnim rozmiarze 45 nm w krzemie pokrytym SiO₂. Osiągnięto to poprzez sekwencyjną implantację As⁺ (energia 170 keV, dawka 3.2·10¹⁶ cm⁻²) w temperaturze 500°C oraz In⁺ (energia 240 keV dawka 3·10¹⁶ cm⁻²) w temperaturze pokojowej, a następnie przez wygrzewanie FLA przez 20 ms w temperaturze ok. 1200°C. Istnienie piramidek potwierdzono przez badania HRTEM. Parametry siatki krystalograficznej piramidek zbadano wykorzystując dyfrakcyjną spektroskopię rentgenowską z użyciem promieniowania synchrotronowego.



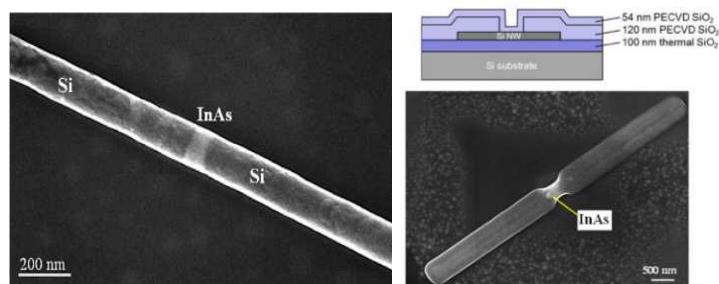
Rys. 46. Nanopiramidki InAs wytworzone na granicy warstw Si/SiO₂ (po lewej) [P9], piramidka InAs osadzona na kolumnie Si [284] (po prawej) oraz charakterystyka prądowo-napięciowa heterozłącza (w środku)

- Wytworzenie nanokropek InP w krzemie [P8] dzięki sekwencyjnej implantacji P⁺ (energia 70 keV, dawka 3·10¹⁶ cm⁻²) oraz In⁺ (energia 170 keV, dawka 2·10¹⁶ cm⁻²), wstępnemu podgrzewaniu w temperaturze 600-700°C i wygrzewaniu milisekundowemu typu FLA przez 200 ms w temperaturach od 900 do 1350 °C. Wytworzone nanokropki zostały następnie odsłonięte przez selektywne trawienie w KOH i poddane badaniom z wykorzystaniem mikroskopii sił atomowych, spektroskopii ramanowskiej, spektroskopii dyfrakcyjnej oraz transmisyjnej mikroskopii elektronowej HRTEM. Wykorzystując mikroskop AFM działający w trybie przewodnościowym zmierzono charakterystykę prądowo-napięciową wytworzonego heterozłącza.



Rys. 47. Obraz AFM nanokropek InP na powierzchni krzemu (po lewej) oraz charakterystyka prądowo-napięciowa wytworzonego heterozłącza InP/Si (po prawej) [P8]

- Wytworzenie nanokropek InAs w nanodrucie krzemowym dzięki implantacjom As⁺ (100 keV) i In⁺ (140 keV) i dawkach rzędu 3·10¹⁶ cm⁻² i wygrzewaniu milisekundowemu. Rozmiar i orientacja nanokropek powstających na drodze epitaksji z fazy ciekłej mogą być kontrolowane przez dawkę implantacji i parametry wygrzewania [P1]. Nanostruktury kwazi-jednowymiarowe przyciągają uwagę naukowców [285-289], gdyż kryje się w nich ogromny potencjał możliwy do wykorzystania w nanoelektronice. Wykazano też możliwość precyzyjnej lokalizacji kropek InAs w nanodrucie poprzez selektywną implantację z wykorzystaniem masek.



Rys. 48 Nanokropki InAs w nanodrucie Si wytworzone w procesie epitaksji z fazy ciekłej podczas FLA [P1]. Po lewej stronie kropka powstała przy implantacji całej objętości nanodrutu, po prawej kropka wytworzona dzięki zastosowaniu masek.

- Wytwarzanie nanokropek GaAs w krzemie i SiO₂ dzięki sekwencyjnej implantacji jonowej As⁺ (energia 180 keV , dawka 3·10¹⁶ cm⁻²) oraz Ga⁺ (energia 200 keV, dawka 4·10¹⁶ cm⁻²). Wykazano że zmieniając parametry wygrzewania wstępnego i wygrzewania FLA można kontrolować orientację krystalograficzną wytworzonych struktur [P5].

7. Literatura

- [1] R. Aymar, Nucl. Fusion 41 (2001) 1301
- [2] N. Holtkamp, Fusion Engineering and Design 82 (2007) 427
- [3] N. Holtkamp, Fusion Engineering and Design 84 (2009) 98
- [4] S. Matsuda K. Tobita Journal Of Nuclear Science And Technology 50 (2013) 321
- [5] J. Ongena and G. Van Oost Transactions of Fusion Science and Technology 49 (2006) 3
- [6] M.G. Haines, Proc. Phys. Soc. 76 (1960) 250
- [7] J.A. Hoekzema, Transactions of Fusion Science and Technology 41 (2002) 191
- [8] S. Cirant, Fusion Scien. and Techn. 53 (2008) 115
- [9] A. Seltzman and J.-P. Floyd II, *Plasma Waves, Heating and Current Drive*, NRE6102 textbook Stacey, Fusion Plasma Physics (2006)
- [10] R. Hemsworth *et al.*, Nucl. Fusion 49 (2009) 045006
- [11] H.P.L. de Esch *et al.*, Fusion Engineering and Design 26 (1995) 589
- [12] P.S. Krstic, D.R. Schultz, IAEA-APID-8 (1998)
- [13] E. Speth *et al.*, Nucl. Fusion, 46 (2006) S220
- [14] U. Fantz *et al.*, Nucl. Fusion, 46 (2006) S297
- [15] A. Staebler *et al.*, Fusion Engineering and Design, 84 (2009) 265
- [16] M. Bacal Nucl. Fusion 46 (2006) S250
- [17] R.K. Janev *Elementary Processes in Hydrogen-Helium Plasma* (1987)
- [18] Cobham Vector Fields, Opera, <http://www.cobham.com>.
- [19] Comsol Multiphysics, <http://www.comsol.com>.
- [20] Integrated Engineering Software, <http://www.integratedsoft.com>.
- [21] T. Kalvas Beam Extraction and Transport arXiv:1401.3951 (doi:10.5170/CERN-2013-007)
- [22] <http://www.mrcwdc.com/magic/description.html>
- [23] <http://esgeotech.com/products/vizglow/>
- [24] <https://www.txcorp.com/vsim>
- [25] D. Dahl, International Journal of Mass Spectrometry 200 (2000) 1
- [26] R. Becker, Rev. Sci. Instrum. 75 (2004) 1723
- [27] P. Spaedtke, KOBRA3-INP user manual, 2000.
- [28] J. E. Boers, PBGUNS: a digital computer program for the simulation of electron and ion beams on a PC, Proc. Int. Conf. on Plasma Sciences, Vancouver, BC, 7–9 June 1993
- [29] S. A. Self, "Exact solution of the collisionless plasma-sheath equation," Phys. Fluids., 6 (1963) 1762
- [30] T. Kalvas, O. Tarvainen, T. Ropponen, O. Steczkiewicz, J. Arje and H. Clark, Rev. Sci. Instrum. 81 (2010) 02B703
- [31] W. Słótko, M. Krysztof, J. Microsc. 237 (2010) 292
- [32] M. Krysztof, W. Słótko, Acta Phys. Pol. A 120 (2011) 19
- [33] M. Krysztof, W. Słótko, Acta Phys. Pol. A 123 (2013) 880
- [34] P. Franzen, J. Sielanko, H.P.L. De Esch, *et al.* Fusion Science And Technology 44 (2003) 776
- [35] P. Franzen, J. Sielanko, H.P.L. De Esch *et al.* Fusion Science And Technology 66 (2003) 585
- [36] A. Stabler, J. Sielanko, S. Gotz *et al.* Fusion Technology 26 (1994) 145
- [37] C.K. Birdsall, A.B. Langdon, *Plasma Physics Via Computer Simulation*, McGraw-Hill, New York (1985).
- [38] R. Hockney, J. Eastwood *Computer Simulation Using Particles*. Mir, Moskwa, (1987).
- [39] V.K. Decyk, S.R. Karmesin, A. de Boer, P.C. Liewer, Computers in Physics 10 (1996) 290
- [40] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, Cambridge, 1986
- [41] R. Courant, K.O. Friedrichs, and H. Levy, *Math. Ann.*, 100 (1928) 32

- [42] M. Bandyopadhyay, A. Tanga (komunikacja prywatna)
- [43] O.Vollmer, B.Heinemann, W.Kraus, P.McNeely, R.Riedl, E.Speth, R.Trainham, R.Wilhem, *Fusion Eng. and Des.* 56 (2001) 485
- [44] M. Bacal, J. Bruneteau and P. Devynck, *Rev. Sci. Instrum.* 59 (1988) 2152
- [45] T. Sakurabayashi, A.Hatayama and M.Bacal, *J. Appl. Phys.* 95 (2004) 3937,
- [46] T. Sakurabayashi, A.Hatayama and M.Bacal, *Rev. Sci. Instrum.* 75 (2004) 1770
- [47] D. Wunderlich, R. Gutser, U. Fantz, *AIP Conference Proceedings* 925 (2007) 46
- [48] A. Dinklage, T. Klinger, G. Marx, L. Schweikhard *Plasma physics: confinement, transport and collective effects*. Berlin-Heidelberg: Springer; 2005.
- [49] E. Speth, H. D. Falter, P. Franzen, U. Fantz *et al*, *Nucl. Fusion* 46 (2006) 220
- [50] www.mcs.anl.gov/mpi/
- [51] B. Wilkinson, M. Allen, *Parallel Programming*, Prentice Hall, Upper Sadle River, (2005)
- [52] <http://www.openmp.org>
- [53] L. Smith, M. Bull M. Development of mixed mode MPI/OpenMP applications, *Sci. Program.* 9 (2001) 83
- [54] L. Smith Mixed mode MPI/OpenMP programming, Technical Report EH9 3JZ, Edinburgh Parallel Computing Centre, 2000.
- [55] G. Jost, H. Jin *et al.* *Comparing the OpenMP, MPI, and Hybrid Programming Paradigms on an SMP Cluster*, NAS Technical Report NAS-03-019 (2003)
- [56] W.C. Swope, H.C. Andersen *et al.* *J. Chem. Phys.* 76 (1982) 637
- [57] Ma S., Sydora R.D., Dawson J.M. *Comp. Phys. Comm.* 77 (1993) 190
- [58] Gutser R., Fantz U., Wunderlich D. *Rev. Sci. Instrum.* 81 (2010) 02A706.
- [59] S.Mochalskyy , Modeling of the negative ion extraction from a hydrogen plasma source. Application to ITER Neutral Beam Injector, praca doktorska, Univ. Paris de Sud, Orsay, 2010
- [60] F. Taccogna *et al*, *Phys. of Plasmas* 17 (2010) 063502
- [61] G.J.M. Hagelaar *et al*, *Plasma Sources Sci. Technol.* 20 (2011) 015001
- [62] J.P. Boeuf *et al*, *Plasma Sources Sci. Technol.* 20 (2011) 015002
- [63] J. Pamela *et al*, *Rev. Sci. Instrum.*, 62 (1991) 1163
- [64] V. Antoni *et al*, *Plasma and Fusion Research: Regular Articles*, 5 (2010) S1014
- [65] H.P.L. de Esch *et al*, *AIP conference proceedings* 1097 (2009) 309
- [66] G. Fubiani, *et al*, *Phys. Rev. Special Top* 11 (2008) 014202
- [67] R. Gutser *et al*, 1st International Symposium on Negative Ions, Beams and Sources, Aix-en-Provence, AIP conference proceedings 1097 (2009) 297
- [68] R. Gutser *et al*, *Plasma Phys. Control. Fusion*, 51 (2009) 045005
- [69] F. Taccogna *et al*, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 36 (2008) 1589
- [70] F. Taccogna *et al*, *Phys. Plasmas* 15 (2008) 103502
- [71] F. Taccogna *et al*, *AIP Conference Proceedings* 1097 (2009) 65
- [72] F Taccogna *et al.* *Plasma Sources Sci. Technol.* 22 (2013) 045019
- [73] K. Miyamoto *et al.* *Appl. Phys. Lett.* 102 (2013) 023512
- [74] S. Mochalskyy, A. Lifschitz and T. Minea, *Nucl. Fusion* 50 (2010) 105011
- [75] S. Mochalskyy, A. F. Lifschitz, T. Minea, *Journal of Applied Physics* 111 (2012) 113303
- [76] S. Mochalskyy, A. F. Lifschitz, T. Minea, *AIP Conference Proceedings* 1390 (2011) 30
- [77] D Wunderlich *et al.* *Plasma Sources Sci. Technol.* 23 (2014) 015008
- [78] S Mochalskyy *et al.* *Plasma Phys. Control. Fusion* 56 (2014) 105001
- [79] S. Mochalskyy *et al.* *Nucl. Fusion* 55 (2015) 033011
- [80] M.M. Abdelrahman, S.G. Zakhary, *Braz. J. Phys.* 39 (2009) 27
- [81] J.R. Pierce, *J. Appl. Phys* 11 (1940) 548
- [82] H. Wituschek, *Rev. Sci. Instrum.* 63 (1992) 2785
- [83] R.G. Wilson and G.R.Brewer; *Ion Beams with Applications to Ion Implantation*, John Wiley and Sons, New York (1973).
- [84] J.Ishikawa, *J. Appl. Phys.* 53 (1982) 6018
- [85] G. Sidenius, *Nucl. Instr. and Meth.* 38 (1965) 26
- [86] W. Hu, C. Sang, T. Tang, D. Wang, *Phys. Plasmas* 21 (2014) 033510
- [87] J. Nie, Q. Chen, Q. Huang, Y. Yang, and W. Sun, *Nucl. Instrum. Meth. B* 307 (2013) 240
- [88] Y. Okawa and H. Takegahara, in *International Electric Propulsion Conference*; Vol. 99 (1999)
- [89] C. D. Child, *Phys. Rev.* 32 (1911) 492
- [90] I. Langmuir, *Phys. Rev.* 2 (1913) 450
- [91] G. Jaffe, *Phys. Rev.* 44 (1944) 91

- [92] R. R. Puri, D. Biswas, R. Kumar, Phys. Plasmas, 11 (2004) 1178
- [93] H. Zhang, *Ion Sources*, Science Press - Springer Beijing-Berlin 1999
- [94] Luginsland et al Phys. Plasmas 9 (2002) 2371, J. W. Luginsland, Y. Y. Lau, and R. M. Gilgenbach Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 4668
- [95] W. S. Koh and L. K. Ang *et al* Physics of Plasmas 12 (2005) 053107
- [96] H. R. Jory and A. W. Travelpiece, J. Appl. Phys. 40 (1969) 3924
- [97] L. K. Ang, T. J. T. Kwan, and Y. Y. Lau, Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 208303
- [98] L. K. Ang, T. J. T. Kwan, and Y. Y. Lau, Phys. Rev. E 64 (2003) 017501
- [99] L. K. Ang, Y. Y. Lau, and T. J. T. Kwan, IEEE Trans. Plasma Sci. 32 (2004) 410
- [100] Y. Y. Lau, D. Chernin, D. G. Colombant, and P.-T. Ho, Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 1446
- [101] T. Lafleur, A. Aanesland, Physics Of Plasmas, 21 (2014) 123506
- [102] M. S. Benilow Plasma Sources Science and Technology 18 (2008) 014005.
- [103] V. A. Lisovskiy, E. P. Artushenko, V. D. Yegorenkov, Journal Of Plasma Physics 80 (2014) 319
- [104] G. Gonzalez, Journal Of Applied Physics 117 (2015) 084306
- [105] P. De Visschere, W. Woestenborghs, K. Neyts, Organic Electronics 16 (2015) 212
- [106] N. F. Mott and R. W. Gurney, *Electronic Processes in Ionic Crystals*, Oxford University Press, 1940
- [107] B. Wolf (Ed.), *Handbook of Ion sources*, CRC Press Inc, Boca Raton, 1995.
- [108] J. W. Kwan, W. W. Chupp, and S. Eylon, Proc. Particle Accelerator Conf. (1997) 2755
- [109] K. Poorrezaei, R. B. Fiorito, R. A. Kishek, B. L. Beaudoin, Phys. Rev. ST Accel. Beams 16 (2013) 082801
- [110] S. Liu, R.J. Dougal J. Appl. Phys. 78 (1995) 5919
- [111] G.J. Beyer, E. Herrmann, A. Piotrowski, V.I. Raiko, H. Tyroff, Nucl. Instrum. Meth. 96 (1971) 437
- [112] P.G. Johnson, A. Bolson, C.M. Henderson, Nucl. Instrum. Meth. 83 (1973).106
- [113] A. Latuszyński, K. Zuber, J. Zuber, A. Potempa, W. Żuk, Nucl. Instrum. Meth. 120 (1974) 321
- [114] H.L. Ravn, S. Sundell, L. Westgaard, Nucl. Instrum. Meth. 123 (1975) 131, A. Piotrowski, R.L. Gill, D.C. McDonald, Nucl. Instrum. Meth. B 224 (1984) 1
- [115] R. Kirchner, Nucl. Instrum. Meth. B 204 (2003) 179, V.N. Panteleev, Rev. Sci. Instrum. 75 (2004) 1602
- [116] G. D. Alton, Y. Liu, D. W. Stracener, Rev. Sci. Instrum. 77 (2006) 03A711
- [117] P. W. Shmor Rev Sci Instrum 73 (2002) 707
- [118] J.R.J. Bennett, U.C. Bergmann, P.V. Drumm, H. Ravn and the ISOLDE Collaboration Nucl. Instrum. Meth. B 204 (2003) 215
- [119] Y. Liu , Y. Kawai, H. Z. Bilheux, Proceedings of 2005 Particle Accelerator Conference, Knoxville, Tennessee, 1581
- [120] U. Köster, O. Arndt, E. Bouquerel, V.N. Fedoseyev , H. Franberg, A. Joinet, C. Jost, I.S.K. Kerkines, R. Kirchner and The TARGISOL Collaboration, Nucl. Instrum Meth. B 266 (2008) 422
- [121] G. de Angelis, Journal of Physics: Conference Series 580 (2015) 012014
- [122] Y. Liu *et al.*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 48 (2015) 115006
- [123] D. Fink *et al.* 344 (2015) 83
- [124] Y. Liu Hyperfine Interactions, 227 (2014) 85
- [125] M. Reponen *et al.* Eur. Phys. J. A 42 (2009) 509–515
- [126] G.D. Alton, Y. Liu, H. Zaim, S. N. Murray, Nucl. Instrum. Meth. B 211 (2003) 425 [127] P.A. Hausladen, D.C. Weisser, N.R. Lobanov, L.K. Fifield, H.J. Wallace, Nucl. Instrum. Meth. B 190 (2002) 402
- [128] G.D. Alton, Y. Zhang, Nucl. Instrum. and Meth A 539 (2005) 540
- [129] A. Osa, S.-I. Ichikawa, M. Matsuda, T. K. Sato, S.-C. Jeong, Nucl. Instrum. Meth. B 266 (2008) 4394
- [130] V.G. Kalinnikov, K.Ya. Gromov, M. Janicki, Yu.V. Yushkevich, A.W. Potempa, V.G. Egorov, V.A. Bystrov, N.Yu. Kotovsky, S.V. Evtisov, Nucl. Instr. and Meth. B 70 (1992) 62
- [131] K.Ya. Gromov, V.G. Kalinnikov, V.M. Tsupko-Sitnikov, AIP Conference Proceedings, 164 (1987) 853
- [132] Y. Zhang, G.D. Alton Nucl. Instrum. Meth. B 241 (2005) 947, Y. Zhang, G.D. Alton, J. Vac. Sci. Techn. A 23 (2005) 1558
- [133] B. Mustapha, J.A. Nolen, Nucl. Instrum. Meth. B 204 (2003) 286, B. Mustapha, J.A. Nolen, Nucl. Instrum. Meth. A 521 (2004) 59
- [134] M. Turrión, O. Tengblad, M. J. G. Borge, E. Reillo, E. R. Morrissey and M. Santana, AIP Conf. Proc. 884 (2007) 278
- [135] M. Knudsen, *The Kinetic Theory of Gases: Some Modern Aspects*, John Wiley Sons, New York (1950)
- [136] C. Eléon, P. Jardin, G. Gaubert, M. Saintlaurent, J. Alcantaranunez, R. Alvesconde, C. Barue, D. Boilley, J. Cornell, P. Delahaye. Nucl. Instr. Meth. B 266 (2008) 4362

- [137] M. Koizumi, A. Osa, M. Oshima, T. Sekine, T. Wakui, W.G. Jin, H. Katsuragawa, H. Miyatake, Y. Ishida, Nucl. Instr. Meth. B 204 (2003) 359
- [138] A. Latuszynski and V. I. Raiko, Nucl. Instrum. Methods 125 (1975) 61
- [139] R. Kirchner, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 292 (1990) 203
- [140] A. Latuszynski and D. Mączka, Vacuum 51 (1998) 109
- [141] D.M. Wayne, W. Hang, D.K. McDaniel, R.E. Fields, E. Rios, V. Majidi Int. J. Mass. Spectrom. 216 (2002) 41
- [142] R.S. Freund, R.C. Wetzel, R.J. Shul, T.R. Hayes Phys. Rev. A 41 (1990) 3575
- [143] A. Zangwill, Physics at Surfaces, Cambridge University Press, Cambridge (1988)
- [144] H. Rossbach and B. Eichler, Zentralinstitut für Kernforschung Rossendorf Report 527 (1984).
- [145] B. Eichler, S. Htibener and H. Rossbach, Zentralinstitut für Kernforschung Rossendorf Report Reports 560 and 561(1985).
- [146] U. Köster, PhD. Thesis, Technical University in Munich, available at the website:
<http://tumb1.biblio.tu-muenchen.de/publ/diss/ph/2000/koester.pdf>
- [147] R. Kirchner Nucl. Instrum. Meth B 26 (1987) 204
- [148] N. Sato, T. K. Sato, M. Asai, K. Tsukada, A. Toyoshima, Z. J. Li, M. Schädel, Y. Nagame, and S. Ichikawa The 4th International Conference on the Chemistry and Physics of the Transactinide Elements (TAN 11) Sochi, Russia, 5-11 September 2011 http://tan11.jinr.ru/pdf/10_Sep/S_1/03_Sato.pdf
- [149] G.J. Beyer, E. Hagebø, A.F. Novgorodov, H.L. Ravn and The ISOLDE Collaboration, Nucl. Instrum. Meth. B 204 (2003) 225
- [150] J. Lettry, R. Catherall, P. Drumm, P. Van Duppen, A.H.M. Evensen, G.J. Focker, A. Jokinen, O.C. Jonsson, E. Kugler, H. Ravn, ISOLDE Collaboration Nucl. Instr. Meth. B 126 (1997) 130
- [151] A.E. Barzakh, V.I. Besnosjuck, I.Ya. Chubukov, V.P. Denisov, D.V. Fedorov, V.V. Lukashevich, M.D. Seliverstov, Yu.Ya. Sergeev, V.I. Tikhonov, Yu.M. Volkov, V.M. Zhelesnjakov, B 126 (1997) 150
- [152] A. Piotrowski, T. Kozłowski, Acta Phys Pol B 31 (2000) 89
- [153] B. Roussiere, F. Ibrahim, J. Sauvage, O. Bajeat, N. Barre, F. Clapier, E. Cottureau, C. Donzaud, M. Ducourtieux, S. Essabaa Nucl. Instr. Meth. B 194 (2002) 151
- [154] E.H. Spejewski, H.K. Carter, B. Mervin, E. Prettyman, A. Kronenberg, D.W. Stracener Nucl. Instrum. Meth. B 266 (2008) 4271
- [155] G.D. Alton, M.T. Johnson, G.D. Mills, Nucl. Instrum. and Meth. A 328 (1993) 154
- [156] G. Amdahl AFIPS Conference Proceedings 30 (1967) 483
- [157] J.M. Nitschke, Nucl Instrum Meth A 236 (1985) 1
- [158] M. Cheikh Mhamed, C. Lau C, S. Essabaa, Rev Sci Instrum 79 (2008) 02B911
- [159] C. Lau C, M. Cheikh Mhamed M, S. Essabaa, Rev Sci Instrum 79 (2008) 02A903
- [160] V.P. Afanasev, V.A. Obukhov *О выходе радиоактивных ядер из мишени источника с поверхностной ионизацией при работе масс-сепаратора на пучке*. Preprint JINR Dubna P13-11698 (1978)
- [161] C.-M. Lee, S.-P. Chang, S.-J. Chang, C.-I. Wu, Int. J. Electrochem. Sci. 8 (2013) 7634
- [162] A. Rohatgi, D. L. Meier, B. McPherson, Y.-W. Ok *et al.* Energy Procedia 15 (2012) 10
- [163] P. Budzynski, A. A. Youssef, B. Kamienska, Vacuum 70 (2003) 417
- [164] B. Tian, W. Yue *et al.*, Vacuum 99 (2014) 68
- [165] C.M. Abreu, M.J. Cristóbal, R. Figueroa, G. Pena, Corrosion Science 54 (2012) 143.
- [166] C.M. Abreu, M.J. Cristóbal, R. Figueroa, X.R. Novoa, G. Pena, M.C. Perez, Defects and Diffusion Forum 289-292 (2009) 175.
- [167] D. Paramanik, S. Varma Nucl. Instr. Meth. B 244 (2006) 692
- [168] F. Komarov, L. Vlasukova, W. Wesch *et al.* Nucl. Instr. Meth. B 266 (2008) 3557
- [169] V. N. Popok Rev. Adv Mater. Sci 30 (2012) 1
- [170] K. Potzger, S. Zhou, F. Eichhorn, M. Helm, W. Skorupa, A. Mücklich, J. Fassbender, J. Appl. Phys. 99 (2006) 063906.
- [171] A. Misiuk, L. Chow, Functional Materials 15 (2008) 1
- [172] S. Prucnal, L. Rebohle, A.N. Nazarov, I.N. Osiyuk, I.P. Tjagulskii, W. Skorupa, Applied Physics B 91 (2008) 123
- [173] F. Priolo, G. Franzó, S. Coffa *et al.*, MRS Proceedings 16 (1993)
- [174] M. Dagenais, *Integrated Optoelectronics* Academic Press 2013
- [175] I. G. Brown, *The Physics and Technology of Ion Sources*, Wiley, Weinheim, 2004
- [176] H. Waldmann, B. Martin, Nucl. Instr. Meth. B 98 (1995) 532
- [177] G.D. Alton Nucl. Instr. Meth. B 73 (1993) 221
- [178] A.A.I. Khalil, N. Sreenivasan, Laser Phys. Lett. 2 (2005) 445

- [179] A.A.I. Khalil, M.A. Gondal, Nucl. Instrum. Methods B 267 (2009) 3356
- [180] H. Yamada, Y. Torii, Rev. Sci. Instrum. 57 (1986) 1282.
- [181] L. Bischoff, J. Teichert, J. Phys. D: Appl. Phys. 33 (2000) L69
- [182] Th. Ganetsos, G.L.R. Mair, C.J. Aidinis, L. Bischoff, Physica B 340–342 (2003) 1166
- [183] P.Mazarov, A.D.Wieck, L.Bischoff, W.Pilz, J.Vac.Sci.Technol. B27 (2009) L47
- [184] G.D. Alton, G.D. Mills, J. Dellwo, Rev. Sci. Instrum. 65 (1994) 2006.
- [185] M. Kanter, Nucl. Instrum. Methods B 70 (1992) 200.
- [186] M.Vasquez, S.Imakita, T.Kasuya, S .Maeno, M. Wada, Rev. Sci. Instr. 81 (2010) 02B717.
- [187] Y.C. Feng, S.P. Wong, Nucl. Instrum. Methods B 149 (1999) 195
- [188] J. Meldizon, A. Drozdziel, A. Latuszynski, S. Prucnal, K. Pyszniak, D. Maczka, Vacuum 70 (2003) 447
- [189] I.G. Brown, B. Feinberg, J.E. Galvin, J. Appl. Phys. 63 (1988) 4889.
- [190] E.M. Oks, A. Anders, I.G. Brown, M.R. Dickinson, R.A. MacGill, Nucl. Instr. Meth. B 127/128 (1997) 779.
- [191] A. Anders, I.G. Brown, M.R. Dickinson, R.A. MacGill, Nucl. Instr. Meth. B. 127/128 (1997) 992
- [192] R. Hollinger, M. Galonska, Nucl. Instrum. Methods B 239 (2005) 227
- [193] R. Wisniewski, A. Czachor, T. Wilczynska, and V.K. Semina, High Press. Res.: An Int. J. 27 (2007) 193
- [194] E.M. Oks, G.Yu. Yushkov, Russ. Phys. J. 37 (1994) 222
- [195] K.O. Nielsen, Nucl.Instr. and Meth.B 1 (1957) 289
- [196] J. O'Connell, The Physics Teacher 37 (1999) 552
- [197] R. N. Evtukhov, S. F. Belykh, and I. V. Redina, Rev. Sci. Instrum. 63 (1992) 2463
- [198] High Voltage Engineering model SO-55 ion source leaflet. <http://www.highvolteng.com/media/Leaflets/Model_SO-55_Ion_Source.pdf>.
- [199] D.S. Fischl, D.W. Hess, J. Vac. Sci. Technol. B 6 (1988) 1577
- [200] T. Hosoya, S. Ohfuji, T. Shibata, J. Electrochem. Soc. 131 (1984) 1135
- [201] R. Figueroa, C.M. Abreu, M.J. Cristóbal, G. Pena, Wear 276–277 (2012) 53
- [202] A.K. Rai, R.S. Bhattacharya, S. C. Kung, J. Appl. Phys. 68 (1990) 5169
- [203] T. Matsuo, K. Miyake, Journal Of Vacuum Science & Technology A 13 (1995) 2138
- [204] P. Van der Avert, S. G. Podkolzin, O. Manoilova, H. de Winne, B. M. Weckhuysen, Chemistry 10(7) (2004) 1637
- [205] J. V. Michael, I. P. Lim, S. S. Kumaran and J. H. Kiefer J. Phys. Chem. 97 (1993) 1914
- [206] F. J. Pomiro, G. G. Fougá, A. E. Bohe, Metallurgical And Materials Transactions B 44b (2013) 1509
- [207] P.L. Bartlett, A.T. Stelbovics, Phys. Rev. A 66 (2002) 012707.
- [208] Y.-K. Kim, P.M. Stone, Phys. Rev. A 64 (2001) 052707,.
- [209] R. S. Freund, R.C. Wetzell, R.J. Shul, T.R. Hayes, Phys Rev. A 41 (1990) 3575.
- [210] D. Margreiter, H. Deutsch, T.D. Maerk, Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes 139 (1994) 127
- [211] Yu.H. Akhmadeev, S.V. Grigoriev, N.N. Koval, P.M. Schanin, Laser Particle Beams 21 (2003) 249
- [212] S.C Moldoveanu, *Pyrolysis of Organic Molecules with applications to Health and Environmental Issues*, Elsevier, 2010
- [213] R. Ritter, G. Kowarik, W. Meissl, A.S. El -Said, A.S. Maunoury, A.S. Lebius, C. Dufour, M. Toulemonde, F. Aumayr, Vacuum 84 (2010) 1062
- [214] M. Terada, N. Nakamura, Y. Nakai, Y. Kanai., S. Ohtani, K. Komaki, Y.Yamazaki, Nucl. Instr. Meth. B, 235 (2005) 452
- [215] G. Hayderer, S. Cernusca, M. Schmid, P. Varga , H.P. Winter, F. Aumayr, D. Niemann *et al.*, Phys. Rev. Lett., 86 (2001) 3530
- [216] A.S. El-Said, R. Heller, W. Meissl, R. Ritter, S. Facsko, C. Lemell, B. Solleder, I.C. Gebeshuber, G. Betz, M. Toulemonde, W. Möller, J. Burgdörfer, F. Aumayr, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 237601
- [217] A.D. Pogrebnjak, O.G. Bakharev, V.A. Martynenko, V.A. Rudenko, R. Brusa, A. Zecca, R. Oechsner, H. Ryssel, I.A. Tikhomirov, A.I. Ryabchikov, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 94 (1994) 81.
- [218] V. N. Popok, I. I. Azarko, and R. I. Khaibullin, *Techn. Phys.* 47 (2002) 459
- [219] T . Schenkel , I .W. Rangelow, R . Keller, S.J. Park, J. Nilsson, A. Persaud, V.R. Radmilovic *et al.*, Nucl. Instr. Meth. B, 219/220 (2004) 200
- [220] D. Maczka, K. Kiszczak, A. Drozdziel, K. Pyszniak, Vacuum, 58 (2000) 536
- [221] G. Rodrigues, P.S. Lakshmy, S. Kumar, A. Mandal, D. Kanjilal, R. Baskaran, A. Roy, Rev. Sci. Instrum. 81 (2010) 02B713

- [222] I. Draganic, T.Nedeljkovic, J.Jovovic, M.Šiljegovic, A. Dobrosavljevic, J. of Phys.: Conf. Ser. 58 (2007) 427
- [223] G.Zschoernack, F.Grossmann, V.P. Ovsyannikov, R. Heller, U. Kentsch, M. Kreller, M. Schmidt, A. Schwan, A. Silze, F. Ullmann, Mat.-wiss. Werkstofftech. 40 (2009) 285.
- [224] V. N. Nevolin, V. Yu. Fominski, A. G. Gnedovets, and G. A. Kiselev, Techn. Phys. 52 (2007) 1475
- [225] A.S. Bugaev, V.I. Gushenets, G.Y. Yushkov, E.M. Oks, A. Anders, I. Brown, A. Gershkovich, P. Spadke, Russ. Phys. J. 44 (2001) 912.
- [226] H. Tawara. et al., Int. J. Mass. Spectrom. 192 (1999) 75
- [227] J.R. Klauder and B. Skagerstam, *Coherent States*, World Scientific, Singapore, 1985
- [228] R.J. Glauber, Phys. Rev. 131 (1963) 2766
- [229] E. Schrödinger, Naturwissenschaften 14 (1926) 664
- [230] A. Perelomov, Commun. Math. Phys. 26 (1972) 222
- [231] A. Perelomov, *Generalized coherent states and their applications*, Springer, Berlin 1986.
- [232] R. Gilmore, *Ann. Phys. (NY)* 74 (1972) 391
- [233] J.A. Yeazell, M. Mallalieu, J. Parker, C.R. Stroud Jr. Phys. Rev. A 40 (1989) 5040
- [234] J.A. Yeazell, M. Mallalieu, C.R. Stroud Jr. Phys. Rev. Lett. 64 (1990) 2007
- [235] G. Alber, P. Zoller *Phys Reports* 5 (1991) 231
- [236] A. ten Wolde, L.D. Noordam et al. Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2099
- [237] <http://www.slacj.uw.edu.pl/en/81.html>
- [238] I.Sh. Averbukh and N.F. Perelman. Phys. Lett. A 139 (1989) 449
- [239] I.Sh. Averbukh and N.F. Perelman Sov. Phys. JETP 69 (1989) 464
- [240] R. Bluhm and V.A. Kosteck'y Phys. Rev. A 50 (1994) R4445
- [241] R. Bluhm and V.A. Kosteck'y Phys. Rev. A 51 (1995) 4767
- [242] R. Arvieu and P. Rozmej Phys. Rev. A 50 (1994) 4376
- [243] R. Arvieu and P. Rozmej Phys. Rev. A 51 (1995) 104
- [244] D. Ito, K. Mori and E. Carriere Nuovo Cimento 51A (1967) 1119
- [245] M. Moshinsky and A. Szczepaniak J. Phys. A: Math. Gen. 22 (1989) L817
- [246] H. Wen, S. N. Pisharody, J. M. Murray and P. H. Bucksbaum Phys. Rev. A 73 (2005) 052504
- [247] B. Chatel, D. Bigourd, S. Weber, B. Girard J. Phys. B 41 (2008) 074023
- [248] W. Eckstein Nucl. Instr. and Meth. B 171 (2000) 435.
- [249] J. Sielanko, J. Filiks, J. Hereć Vacuum 70 (2003) 381
- [250] J. Sielanko, W. Szyszko Surf. Sci. 161 (1985) 101
- [251] J. Sielanko, W. Szyszko Nucl. Instrum. Meth. B 16 (1986) 340
- [252] M. Smolira, J. Sielanko Annales UMCS Inform. 3 (2005) 219
- [253] F. Corni, G. Calzolari, F. Gambetta, C. Nobili, R. Tonini, M. Zapparoli Materials Science and Engineering B71 (2000) 207
- [254] G.F. Cerofolini, G. Calzolari, F. Corni, S. Frabboni, C. Nobili, G. Ottaviani, R. Tonini, Phys. Rev. B 61 (2000) 10183
- [255] E. Oliviero, M. L. David, M. F. Beaufort, J. F. Barbot, A. van Veen Appl. Phys. Lett., 81 (2002) 4201
- [256] S. Godey, E. Ntsoenzok, T. Sauvage, A. van Veen, F. Labohm, M.F. Beaufort, J.F. Barbot Mat. Sci. and Eng. B73 (2000) 54
- [257] P. Desgardin, M.-F. Barthe, E. Ntsoenzok, C.-L. Liu Applied Surface Science 252 (2006) 3231
- [258] R. Hanada, S. Saito, S. Nagata, S. Yamaguchi, T. Shinozuka, I. Fujioka, Mat. Sci. Forum 196-201 (1995) 1375
- [259] P.A. Redhead, Vacuum 12 (1962) 203
- [260] E. Vittone., C. Ricciardi, A. Lo Giudice, F. Fizzotti, C. Manfredotti, G. Egeni, V. Rudello, Nucl. Instr. Meth. B 181 (2001) 184
- [261] D.N. Jamieson., D.R.Beckman, A.A. Bettiol, J.S. Laird, K.K. Lee, S. Prawera, A. Saint, L.C.G. Witham, C.Yang, Nucl. Instr. Meth. B 158 (1999) 628
- [262] H. Calvo del Castillo, J.L. Ruvalcaba, T. Calderón, Anal. Bioanal. Chem. 387 (2007) 869
- [263] T. Calderon Rev. Mex. Fis. S54 (2008) 21
- [264] J.S. Laird, J. Wilkinson, C. Ryan, A. Bettiol, Nucl. Instr. Meth. B 269 (2011) 2244
- [265] G.E. King, A.A. Finch, R.A.J. Robinson, D.E. Hole, Radiation Measurements 46 (2011) 1
- [267] R. Kuduk, M. Kulik, D. Maczka, K. Pysznik and J. Żuk, Physica Status Solidi A 112 (1989) 799
- [268] J. Zuk, T. Ochalski, M. Kulik, J. Liskiewicz, A.P. Kobzev, J. Luminescence 80 (1998) 187
- [269] G. Gawlik, J. Jagielski, A. Stonert, R. Ratajczak Nucl. Instr. Meth. B, 267 (2009) 2579

- [270] C. Manfredotti, S. Calusi, A. Lo Giudice, L. Giuntini, M. Massi, P. Olivero, A. Re Diam. & Rel. Mat. 19 (2010) 854
- [271] E. Wendler, G. Peiter J. Appl. Phys. 87 (2000) 7679
- [272] http://www.surrey.ac.uk/ati/ibc/research/modelling_simulation/suspre.htm
- [273] G.S. Marlow, M.B. Das, The effects of contact size and non zero metal resistance on the determination of specific contact resistance. Solid State Device Laboratory and Material Research Laboratory, Pennsylvania, 1981.
- [274] S. Prucnal, J. M. Sun, W. Skorupa, Appl. Phys. Lett. 90 (2007) 181121
- [275] A. N. Nazarov, I.N. Osiyuk, *et al.*, Applied Physics B-Lasers and Optics 87 (2007) 129
- [276] S. Prucnal, L. Rebohle, A. Kanjilal, H. Krzyżanowska, W. Skorupa, W Electrochemical and Solid-State Letters, 12 (2009) H333
- [277] T. Y. Kim, N.M. Park, N., K.H. Kim, G.Y. Sung, Y.W. Ok *et al.*, Applied Physics Letters 85 (2004) 5355
- [278] G. Franzò, E. Pecora, F. Priolo, F. Iacona, Applied Physics Letters 90 (2007) 183102
- [279] M.D. Dvorak, B.L. Justus, D.K. Daskill, D.G. Hendershot, Appl. Phys. Lett. 66 (1995) 804
- [280] T. Shmizu-Iwayama, K. Fujita, S. Nakao, K. Saitoh, T. Fujita, N. Itoh, J. Appl. Phys. 75 (1994) 7779
- [281] R. Ding, H. Wang, H. Yang, W. She, Z. Qiu, L. Luo, W.F. Lau, W.Y. Cheung, S.P. Wong, Mater. Chem. Phys. 76 (2002) 262
- [282] R.L. Wells, S.R. Aubuchon, S.S. Kher, M.S. Lube, Chem. Mater. 7 (1995) 793
- [283] A. Meldrum, L.A. Boatner, C.W. White, Nucl. Instrum. Meth. B 178 (2001) 7
- [284] S. Prucnal, S. Facsko, Ch. Baumgart, H. Schmidt, M. O. Liedke, L. Rebohle, A. Shalimov, H. Reuther, A. Kanjilal, A. Muecklich, M. Helm, J. Zuk, and W. Skorupa, Nano Letters, 11 (2011) 2814
- [285] M. Hocevar, G. Immink, M. Verheijen, N. Akopian, V. Zwiller, L. Kouwenhoven, E. Bakkers Nature Commun. 3 (2012) 1
- [286] K. Tomioka, M. Yoshimura, T. Fukui, Nature 488 (2012) 189
- [287] J. Justice, Ch. Bower, M. Meitl, M.B. Mooney, M.A. Gubbins, B. Corbett, Nature Photon. 6 (2012) 610
- [288] C.D. Bessire, M.T. Björk, H. Schmid, A. Schenk, K.B. Reuter, H. Riel, Nano Lett. 11 (2011) 4195
- [289] K.W. Ng, W.S. Ko, T.T. Tran, R. Chen, M.V. Nazarenko, F. Lu, V.G. Dubrovskii, M. Kamp *et al.*, ACS Nano 7 (2013) 100

Manar Tund