

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : Etude de la fonction diélectrique des matériaux 2D et de son rôle dans le processus d'émission électronique secondaire

Référence : **PHY-DPHY-2023-05**
(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : 2023

Date limite de candidature : mars 2023

Mots clés

Modélisation, Méthodes Premiers Principes, émission secondaire, fonction diélectrique complexe, DFT, Ab initio

Profil et compétences recherchées

Nous recherchons un étudiant Physicien Master et/ou 5^{ème} année école d'ingénieur ayant des connaissances de physique générale, physique du solide, physique des matériaux. Des notions sur la fonction diélectrique des matériaux serait un plus. Le projet étant principalement théorique, l'étudiant devra montrer un goût prononcé pour la modélisation.

Les écoles et formations types : Master Physique, Physique de la matière, Physique du solide, modélisation physique

Ecoles d'ingénieurs (INSA Lyon, Toulouse, Polytech, Telecom Physique Strasbourg, PHELMA, etc.

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

Le département DPHY de l'ONERA étudie, en partenariat avec les industriels du spatial et les agences comme le CNES ou l'ESA, les effets des radiations de l'environnement spatial sur les véhicules spatiaux. L'effet Multipactor est un processus de décharge électrique qui se déclenche dans les composants Radio Fréquence (RF) des satellites sous certaines conditions. L'émission électronique secondaire est un des mécanismes physiques qui pilotent l'effet Multipactor les plus contraignants qu'il faut savoir contrôler. En effet, les parois d'un composant hyper-fréquence peuvent, sous l'impact des électrons résiduels présents dans les cavités, et par un effet de résonance avec l'onde guidée, produire un nuage électronique qui va dans certaines conditions être la source de décharges de type corona. C'est un problème qui, pour être évité, nécessite d'utiliser des matériaux présentant de faibles niveaux d'émission électronique. On entend par émission électronique, la capacité d'une paroi à émettre plus d'un électron lorsque celle-ci est impactée par un électron incident. Une solution envisagée pour limiter l'émission secondaire est donc de déposer à la surface des guides d'ondes, des matériaux peu émissifs en termes d'électrons. Le graphite est connu pour ses bonnes caractéristiques. Les films 2D de graphène sont aussi une solution qui semble encore plus efficace. L'objectif du travail est donc de mieux comprendre quelles sont les caractéristiques physiques du graphène qui le rendent si efficace pour limiter l'émission secondaire.

L'émission secondaire que l'on souhaite limiter est la conséquence des interactions des électrons incidents avec les électrons du solide irradié. Ces derniers sont mis en mouvement et peuvent sortir du matériau avec l'énergie cinétique acquise. L'émission secondaire est donc gouvernée par les transferts d'énergie caractéristiques des rayonnements incidents avec les électrons du solide irradié. Or, la fonction diélectrique complexe représente la réponse d'un matériau à une excitation électromagnétique, donc à l'impact d'une particule chargée comme un électron. La partie imaginaire caractérise notamment les transferts d'énergie vers le cortège électronique des atomes du matériau soumis aux particules. Le but est donc d'étudier et comprendre le lien entre la fonction diélectrique complexe des matériaux et sa capacité d'émission électronique. Pour cela, on utilisera deux types d'outils de simulation. On réalisera des calculs DFT pour évaluer la fonction diélectrique. L'émission électronique secondaire sera réalisée à l'aide d'un code de transport des électrons par la méthode de Monte Carlo. Les paramètres de ces dernières simulations (sections efficaces d'interaction électron/électron) étant déterminés par les calculs DFT préalables. On s'intéressera principalement à deux matériaux : le graphite et le graphène. Nous identifierons les écarts entre les fonctions diélectriques de ces deux matériaux et les corrèlerons aux écarts dans les rendements d'émission secondaire.

Les calculs ab-initio seront faits dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et de sa généralisation au domaine du temps (Time Dependent DFT). Ces théories permettent de calculer la fonction diélectrique complexe d'un matériau et de l'exprimer en fonction de l'énergie et du moment cédés par les électrons incidents au matériau. Ces simulations demandent l'utilisation d'approximations et méthodes numériques adaptées qui ont été développées dans le passé par la communauté et implémentées dans plusieurs codes de simulation en accès libre. L'étudiant utilisera donc un de ces logiciels libres (ex. GPAW [1]) pour mener à bien les calculs de la fonction diélectrique par DFT.

Les calculs d'émission secondaire seront réalisés quant à eux grâce au code de Monte Carlo développé à l'ONERA sur la base de la librairie GEANT4 [2]. Cet outil permet le calcul des rendements d'émission secondaire dans des géométries composées d'un substrat métallique recouvert d'un fin dépôt de matériau à sa surface. Les paramètres de simulation préalablement calculés par DFT seront implémentés dans l'outil Monte Carlo pour chaque matériau (graphite et graphène) afin d'évaluer les rendements d'émission secondaire (nombre d'électrons incidents / nombre d'électrons réfléchis) pour ces différents dépôts. On pourra faire varier notamment l'épaisseur des couches de graphite et de graphène et analyser l'impact sur les rendements.

L'objectif de l'étude sera donc de comprendre ce qui, dans la structure électronique du graphène, le rend particulièrement peu émissif. Le travail consistera essentiellement à développer des calculs ab-initio et Monte Carlo mais s'appuiera aussi sur des mesures expérimentales de la littérature ou réalisées au laboratoire.

Ce projet s'inscrit dans le Projet de Recherche (PRF) ONERA COMODHO qui rassemble les moyens de plusieurs départements de l'ONERA (physique et instrumentation, optique, matériaux).

[1] <https://wiki.fysik.dtu.dk/gpaw/>

[2] <https://geant4.web.cern.ch/>

Collaborations envisagées

Cofinancement CNES/ONERA

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Physique, instrumentation, environnement, espace

Lieu (centre ONERA) : Toulouse, Châtillon

Contact Toulouse : Christophe Inguibert

Tél. : 05 62 25 27 34

Email: christophe.inguibert@onera.fr

Contact Châtillon : Lorenzo Sponza

Tél. : 01 46 73 44 64

Email: lorenzo.sponza@onera.fr

Directeur de thèse

Nom : Christophe Inguibert

Laboratoire : ONERA-DPHY

Tél. : 05 62 25 27 34

Email : christophe.inguibert@onera.fr

Co direction :

Nom : Lorenzo Sponza

Laboratoire : ONERA-DMAS, CNRS / LEM

Tél. : 01 46 73 44 64

Email : lorenzo.sponza@onera.fr

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>