ONERA
THE FRENCH AEROSPACE LAB

www.onera.fr

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-2024-15**
(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : 2024	**Date limite de candidature :** mars 2024

Mots clés

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

Profil et compétences recherchées

Nous recherchons un(e) étudiant(e) Physicien Master et/ou 5ème 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(e) devra montrer un goût prononcé pour la modélisation.

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

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. Dans ce cadre, nous nous intéressons à l'effet multipactor qui est un processus de décharge électrique qui se déclenche dans les composants radio fréquence (RF) des satellites. L'émission électronique secondaire est la source qui pilote cet effet. La compréhension de ce mécanisme physique est l'objectif principal de la thèse. 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 résonnance avec l'onde guidée, produire un nuage électronique qui va dans certaines conditions être la source de décharges électrostatiques. 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'onde, des matériaux peu émissifs en termes d'électron. Le graphite est connu pour ses bonnes caractéristiques. Les films 2D de Graphene sont aussi une solution qui semble encore plus efficace. L'objectif du travail est donc de mieux comprendre quelles sont les caractéristiques physiques du Graphene qui le rendent si efficace pour limiter l'émission

Pour mener à bien ce travail on s'appuie sur la modélisation du transport des électrons dans la matière par la méthode de Monte Carlo (MC). On sait simuler la part des électrons qui ressortent d'un solide irradié. La méthode MC utilisée est le fruit de 2 thèses précédentes ONERA/CNES/CEA (Juliette Pierron (2014-2017) et Quentin Gibaru (2019-2022)). Dans le cas du travail envisagé ici, on passe d'un matériau classique à un matériau 2D. Cela modifie sensiblement l'approche utilisée pour paramétrer notre modélisation qui s'appuie sur la fonction de perte d'énergie du solide. Cette fonction se déduit des indices diélectriques complexes du matériau. Or, dans le cas du Graphene comme pour d'autres matériaux 2D, cette fonction est mal connue et change en fonction du nombre de couches utilisées. Le but du travail est donc d'étudier en détail la fonction diélectrique, par exemple en fonction du nombre de couches atomiques pour pouvoir alimenter correctement le code de Monte Carlo et ainsi calculer proprement les rendements d'émission secondaire. Ce travail amont sur la fonction diélectrique présente aussi un très fort intérêt dans d'autres domaines scientifiques comme l'optique ou la thermique : cette fonction est en effet à la base de la caractérisation de nombreux phénomènes physiques.

D'un point de vue technique, l'émission secondaire d'une surface métallique recouverte de Graphene sera évaluée à l'aide de notre code de simulation de Monte Carlo développé au cours des 2 thèses CNES précédentes. Ce travail est disponible dans la librairie GEANT4 [1] que nous développons dans le cadre de la collaboration internationale des développeurs de cette librairie. La fonction de perte d'énergie sera calculée

par méthode DFT (Density Functional Theory),et confrontée à des mesures expérimentales. La DFT fait partie des méthodes de calcul en physique des matériaux qualifiées d'Ab initio, car même si elles peuvent reposer sur certaines approximations, elles ne nécessitent aucun paramètre d'ajustement. On pourra ainsi étudier l'évolution de la fonction diélectrique en fonction du nombre de couches atomiques, calculer l'évolution des rendements d'émission secondaire en fonction de l'épaisseur de Graphene sur le métal, et comprendre les raisons physiques qui limitent l'émission secondaire. Cela permettra aussi de définir des éléments de connaissances transposables à d'autres matériaux, améliorant notre efficacité d'évaluation de leur capacité d'émission secondaire. Ce projet de recherche contribuera à nos capacités de prédiction de l'effet multipactor, réduisant alors les besoins de tests, coûteux, de caractérisation matériaux et de puissance seuil multipactor des systèmes RF.

[1] https://geant4.web.cern.ch/

[2] https://wiki.fysik.dtu.dk/gpaw/

Collaborations envisagées

Financement 50 % CNES 50 % ONERA

Ou 100% ONERA

Laboratoire d'accueil à l'ONERA	**Directeur de thèse**
Physique, instrumentation, environnement, espace	Nom : Christophe Inguimbert
Lieu (centre ONERA) : Toulouse, Châtillon	Laboratoire : ONERA-DPHY
Contact Toulouse : Christophe Inguimbert	Tél. : 05 62 25 27 34
Tél. : 05 62 25 27 34	Email : christophe.inguimbert@onera.fr
Email: christophe.inguimbert@onera.fr	
Contact Châtillon : Lorenzo Sponza	Co direction :
Tél. : 01 46 73 44 64	Nom : Lorenzo Sponza
Email: lorenzo.sponza@onera.fr	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