

La couronne neutre suprathermique de Mars:Modélisation et étude d'une instrumentation pour sa mesure In Situ

Fabrice Cipriani

► To cite this version:

Fabrice Cipriani. La couronne neutre suprathermique de Mars:Modélisation et étude d'une instrumentation pour sa mesure In Situ. Astrophysique [astro-ph]. Université de Versailles-Saint Quentin en Yvelines, 2006. Français. NNT: . tel-00141140v1

HAL Id: tel-00141140 https://theses.hal.science/tel-00141140v1

Submitted on 11 Apr 2007 (v1), last revised 1 May 2007 (v2)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines

THESE

Présentée par

Fabrice CIPRIANI

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines

Spécialité :

Astrophysique et Techniques Spatiales

La couronne neutre suprathermique de Mars : modélisation et développement d'une instrumentation pour sa mesure in situ.

soutenue publiquement le 06 Octobre 2006

Membres du jury:

Mr G. CERNOGORA Mr E. CHASSEFIERE Mme O. DUTUIT Mr R. BAPTIST Mr O. WITASSE Mr J. BARJON Mr J.J. BERTHELIER Mr F. LEBLANC

Président Rapporteur Rapporteur Examinateur Examinateur Directeur de thèse Co-Directeur de thèse

Le but du programme spatial n'est pas de surpasser les soviétiques. Il s'agit de construire un pont vers les étoiles, afin qu'à la mort du Soleil l'humanité ne disparaisse pas avec lui.[...] Extrait d'un discours de WERHNER VON BRAUN (1961)

A Grace, son Sauveur, et à Noé, qui leur sourit d'en bas

.Remerciements

Voici l'aboutissement du voyage initiatique que fut cette thèse, vécue en majeure partie dans l'atmosphère détendue, un rien champêtre, un zeste bucolique, du site enchanteur de l'Observatoire de Saint Maur.

J'aimerais remercier en premier lieu Hervé de Féraudy, directeur du CETP, garant de mon existence administrative au sein du laboratoire, pour l'intérêt qu'il a montré vis-à-vis de mon travail, pour son soutien à mes différentes aspirations, et enfin pour son rôle actif dans l'interaction que j'ai pu avoir avec la communauté des plasmas froids dans les premiers mois de ma thèse.

J'adresse un certain nombre, incommensurable, de remerciements à Jean-Jacques Berthelier, du CETP, et François Leblanc, du Service d'Aéronomie du CNRS, tous deux directeurs de ma thèse, et instigateurs de nombres de mes réflexions azimuthées. Je leur suis en premier lieu reconnaissant pour la confiance qu'ils m'ont accordée en me permettant de réaliser ce projet de thèse. A Jean-Jacques, j'aimerais dire merci pour sa rigueur et son exigence de tous les instants, ses conseils avisés, et la force de ses remarques, toujours sources d'inspiration et de réflexion. J'espère m'être imprégné à son contact d'un peu de la philosophie qui doit habiter un chercheur instrumentaliste. Je lui suis également reconnaissant pour la très large autonomie dont j'ai pu bénéficier tant sur le plan expérimental que lors de mon implication sur des aspects plus thématiques. A François, je souhaiterais exprimer une infinie gratitude, pour m'avoir accueilli, néophyte non averti des exosphères planétaires, puis épaulé tout au long de la progression mon travail de modélisation, et enfin pour m'avoir permis d'effleurer par la pensée les mystères de la Planète Rouge. C'est non seulement pour nos discussions sur la physique, mais aussi pour sa disponibilité, sa capacité d'écoute, en quelques mots ses qualités humaines, que j'ai particulièrement apprécier de travailler avec lui. A tous deux je souhaiterais enfin dire merci pour la détermination et le courage qu'ils ont su m'insuffler tout au long de cette thèse, qui m'ont permis de concilier des travaux à la fois très expérimentaux et théoriques, dans des domaines aussi variés que passionnants.

Les travaux présentés dans ce mémoire n'auraient pas été envisageables sans l'apport financier du CNRS d'une part, et du CNES, d'autre part. J'adresse donc mes remerciements les plus sincères à ces deux instituts, et à Francis Rocard en particulier, pour la confiance qu'ils m'ont accordée. En outre, les développements expérimentaux de cette thèse n'auraient pu voir le jour sans une interaction étroite avec deux des principaux acteurs français des micro et nanotechnologies. Je remercie donc chaleureusement Robert Baptist du CEA/LETI, et ce à double titre, en premier lieu pour avoir accepté de parrainer cette thèse, en dépit de ses obligations déjà fort nombreuses, en second lieu pour avoir toujours répondu présent à mes nombreuses sollicitations, relatives notamment au domaine des micropointes. Je tiens également à remercier vigoureusement Francis Muller et Denis Sarrasin du CEA/LETI, ainsi que les différentes personnes croisées lors de mes différents passages au CEA, pour leur disponibilité, le temps consacré à ma formation sur les cathodes à micropointes, ainsi que pour les nombreux échanges et tests réalisés au cours de nos avancées expérimentales.

J'exprime par ailleurs mes remerciements aux acteurs essentiels du changement d'échelle qui s'est opéré au cours de cette thèse : d'une part, à Jean Dijon et à son équipe du CEA/LETI, pour l'intérêt montré vis-à-vis de nos projets concernant l'emploi des nanotubes de carbone, et d'autre part, à Pierre Legagneux, de Thales Research and Technology, ainsi qu'à son ancien thésard Eric Minoux, pour l'enthousiasme de leur accueil, et l'intérêt qu'ils ont spontanément manifesté vis-à-vis de nos applications. Ces interactions fructueuses déboucheront je l'espère sur de passionnantes collaborations.

J'aimerais remercier très chaleureusement l'ensemble de l'équipe d'instrumentation spatiale du CETP Saint Maur, et plus particulièrement les familiers des machines infernales d'un certain rez-dechaussée, Jean-Marie, Jean, Michel, Frédéric, et Pierre. Je leur sais gré non seulement de l'accueil salvateur dont j'ai pu bénéficier, mais aussi de leurs fortes compétences individuelles, sources d'enrichissement, et qui m'auront souvent permis d'éviter bien des écueils. Merci en particulier à Jean-Marie Illiano pour son regard incisif, ses conseils judicieux, et son aide de tous les instants, cruciale, au démarrage de ma modeste expérience. J'adresse un énorme merci à Frédéric Leblanc, pour sa dextérité déjà légendaire, son astuce, et son aide déterminante dans tous les domaines de l'électronique. J'exprime également un remerciement spécial à Jean Covihnes, pour ses critiques souvent pertinentes, toujours constructives, et son insatiable propension à communiquer, ne serait ce que sa joie et sa bonne humeur. Tous m'ont donné un temps précieux d'aide et d'échange et j'espère avoir profité au maximum de leur expérience.

La rareté des êtres accroissant leur valeur je souhaiterais saluer l'ensemble du petit nombre de résidents journaliers ou occasionnels du site de l'Observatoire. Tout d'abord mes «labadenseuses »qui par leur présence participèrent tant à la survie d'une espèce menacée du parc qu'à son charme, et qui contribuèrent sans doute à l'amenuisement d'un sentiment bien connu du thésard qu'on appelle solitude. Merci donc à Aurélie, notamment pour ses conseils avisés et ses encouragements de tous les instants face à l'adversité. Merci bien sûr à Alice, qui m'octroya le droit de terminer ma thèse moins rapidement, et à son goût prononcé - que je partage - pour la vie (terrestre ou extra terrestre).

J'adresse qui plus est un fourgon des remerciements, quitte à en étonner quelques uns, aux différents couloirs et encadrements de portes des bâtiments du CETP, espaces propices aux rencontres fortuites et aux discussions bienfaitrices. C'est ainsi que par le biais de ces nécessaires canevas architecturaux, ma route a souvent croisé celle d'Elena, à qui je décerne unilatéralement le premier prix de réparatrice de moral, mais aussi Monique Petitdidier, qui n'aura jamais manqué de me soutenir et de me pousser à la remise en cause, mon voisin de pallier Raymond, sourire vissé aux lèvres, et adepte - comme je le comprends - des ambiances montagnardes, Dominique D, que je remercie pour sa gentillesse, ses conseils et son ouverture d'esprit, Françoise, chantre d'un foyer-bibliothèque, trouveuse à l'efficacité redoutable, que je remercie, notamment, pour sa bonne humeur et sa gentillesse, Jean-Claude Cerisier, que je remercie, notamment, pour son réalisme et sa sagesse, Michel Hamelin, Michel Malingre, Fernando, Christiane Chevalier et Michèle Sedoni, Evelyne, Josette, Monique Masseboeuf, Richard, et bien sûr Alain, Joani, Michel, Rémi, le bretonnant Fabrice, Sébastien, David, Antoine, Benjamin, Christophe, et Charlotte, qui eu l'excellente idée de s'expatrier de Vélizy, que je remercie pour leur gentillesse, dans beaucoup de cas pour leur disponibilité, et pour la qualité des instants passés en leur compagnie. Merci à toutes et à tous d'avoir contribuer faire de cette thèse un moment plus agréable.

J'aimerais adresser un remerciement spécial aux différents membres de mon jury, Odile Dutuit, Olivier Witasse, Eric Chassefière, Julien Barjon, Robert Baptist, et Guy Cernogora, tout d'abord pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de juger le présent travail, ensuite pour avoir pris le temps de lire en profondeur une prose que j'aurais souhaitée nettement plus sibylline, et enfin, pour les discussions que nous avons pu avoir, toujours positives et constructives.

Merci bien sûr à Agnès Acker, de l'Observatoire de Strasbourg, sans qui je n'aurais jamais osé m'aventurer sur les chemins sinueux de la recherche.

Merci enfin à mes parents, ainsi qu' à Aude, pour leur soutien sans faille et de tous les instants, pour être parvenus à me supporter tout au long de ces années, et pour le reste.

_ TABLE DES MATIÈRES

R	Remerciements				
In	Introduction				
Ι	Mo	odélisa	tion de la couronne neutre chaude martienne	1	
1	L'ei	nviron	nement de la planète Mars	3	
	1.1	L'atm	osphère neutre	3	
		1.1.1	Caractéristiques principales	3	
		1.1.2	Couplages et perturbations de la haute atmosphère	5	
	1.2	L'iono	psphère	6	
		1.2.1	Caractéristiques principales	6	
		1.2.2	Mécanismes de production et de perte	7	
		1.2.3	Transport et échappement du plasma	8	
	1.3	L'exos	sphère	9	
		1.3.1	Structure de l'exosphère et mécanismes d'échappement	10	
		1.3.2	Interaction avec le vent solaire et conséquences sur l'évolution de l'atmosphère	11	
2	Pro	ductio	on et Echappement des neutres suprathermiques	16	
	2.1	Les ne	eutres énergétiques dans les exosphères des planètes telluriques	17	
	2.2 Sources de neutres suprathermiques dans l'atmosphère martienne		es de neutres suprathermiques dans l'atmosphère martienne	19	
		2.2.1	Le criblage de l'atmosphère par des ions énergétiques	19	
		2.2.2	La recombinaison dissociative	26	
	2.3	Modé	lisation numérique des processus	33	
		2.3.1	Modèles atmosphériques	33	
		2.3.2	Modèle physique et approche adoptée pour la simulation	35	
		2.3.3	Domaine de calcul	38	
		2.3.4	Termes sources	39	

TABLE DES MATIÈRES

	2.3.5	Modèle numérique	40
	2.3.6	Calcul des phases de transport et de collisions	44
2.4	Princi	paux résultats obtenus	45
	2.4.1	Densités exosphériques	45
	2.4.2	Echappement	54
	2.4.3	Distributions d'énergie et de vitesses	58
2.5	Améli	orations et extensions possibles	64
	2.5.1	Amélioration du traitement numérique des collisions	64
	2.5.2	Extensions de l'étude	64
		2.5.2.1 La photodissociation de CO	65
		2.5.2.2 La recombinaison dissociative de CO_2^+	65
	2.5.3	Autres sources	66

IILes sources d'électrons à effet de champ : présentation et caractérisation descathodes à micropointes et à nanotubes de carbone75

3	\mathbf{Les}	Les émetteurs d'électrons à effet de champ				
	3.1 Les cathodes à micropointes		thodes à micropointes	78		
		3.1.1	Description et procédé de réalisation	78		
		3.1.2	L'émission par effet de champ	80		
		3.1.3	Densité de courant émis et loi de Fowler-Nordheim	82		
		3.1.4	Distribution en énergie des électrons (cas d'une monopointe) $\ldots \ldots \ldots$	85		
		3.1.5	Distribution angulaire	86		
		3.1.6	Applications des cathodes à micro-pointes	88		
	3.2	Les ca	thodes à nanotubes de carbone	89		
		3.2.1	Description et procédés de fabrication	89		
		3.2.2	Principe physique et fonctionnement des cathodes à nanotubes $\ldots \ldots \ldots$	92		
	3.3	3.3 Montage et mise en œuvre des cathodes				
		3.3.1	Cathodes à micropointes	92		
		3.3.2	Cathodes à nanotubes de carbone	94		
4	$\mathbf{Dis}_{\mathbf{I}}$	positif	expérimental pour la caractérisation des cathodes	101		
	4.1	Principe de la mesure				
	4.2	.2 Descripiton du dispositif de mesure				
		4.2.1	Analyseur en énergie	107		
	4.3	4.3 Analyseurs en énergie : modélisation et calcul des performances				
		4.3.1	Modèle numérique 2D, résolution en énergie et fonction de transfert $\ .$	108		
		4.3.2	Calcul de la résolution et de la fonction de transfert $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	114		
		4.3.3	Modèle 3D, évaluation des différences apportées par la géométrie non axisymé-			
			trique entre la cathode et le diaphragme	117		

		4.3.4	Etude des sources de perturbation de la mesure	118
			4.3.4.1 Influence du champ magnétique terrestre	118
			4.3.4.2 Influence des électrons secondaires	119
5	Etu	de exp	périmentale : principaux résultats obtenus lors de la caractérisation des	
	com	posan	ts 1	127
	5.1	Catho	des à micro-pointes	127
		5.1.1	Mise en œuvre	127
		5.1.2	Caractéristique courant-tension	127
		5.1.3	Stabilité, fluctuations et durée de vie	130
			5.1.3.1 Stabilité	130
			5.1.3.2 Fluctuations \ldots	132
			5.1.3.3 Durée de vie	133
		5.1.4	Spectre en énergie des électrons et interprétation	133
		5.1.5	Distribution angulaire des électrons	146
	5.2	Catho	des à Nanotubes de carbone	151
		5.2.1	Caractéristique courant-tension	151
		5.2.2	Spectres en énergie des électrons	155
		5.2.3	Distribution angulaire des électrons	157

IIIApplications des cathodes froides en spectrométrie de masse - Mesure dela composante suprathermique de l'exosphère martienne163

6	Source d'ionisation pour un spectromètre de masse classique : l'expérience PA-			
	LOMA			
	6.1	Princi	pe et description du spectromètre	166
	6.2	Source	e d'ionisation	167
7	Le s	spectro	omètre HNA	172
	7.1	Objec	tifs	172
	7.2	Etude	d'une source d'ionisation à très grande luminosité	173
		7.2.1	Objectifs	173
		7.2.2	Géométrie de la source	175
		7.2.3	Charge d'espace électronique dans la source et influence sur le fonctionnement	176
		7.2.4	Sensibilité de la source	180
	7.3	Princi	pe du spectromètre HNA	183
		7.3.1	Analyse en énergie	183
		7.3.2	Analyse en masse	185
	7.4	Perfor	mances et simulation de la mesure	188
		7.4.1	Contraintes issues du modèle d'exosphère	188
		7.4.2	Gammes d'énergie et de masse	194

7.4.3 Direction	$de visée \ldots \ldots$	195
7.4.4 Résolutio	n temporelle	195
Conclusions et Perspe	ectives	200
Annexes		204
Résultats complément	taires du modèle de couronne suprathermique	204
Système de command	e et d'acquisition	219
Conduite du projet de	e thèse	224
Articles issus du trava	ail de thèse	232

Introduction

L'évaluation du contenu en eau du sous-sol et de l'atmosphère, la caractérisation des réservoirs hydriques, et la compréhension de l'évolution de l'eau sur Mars au cours des âges géologiques, figurent à l'heure actuelle parmi les thématiques principales des programmes d'exploration martiens. Ces questions apparaissent comme des objectifs importants de Mars Express, la première mission Européenne vers la planète rouge, en orbite depuis janvier 2004. La détermination des conditions thermodynamiques de l'atmosphère, et de sa composition il y a 4.1 milliards d'années, lors de l'arrêt supposé de la dynamo martienne (Acuña et al., 1998), est importante pour la compréhension de l'histoire de Mars, et l'étude générale des conditions d'apparition de la vie dans le Système Solaire, à une période où la vie sur Terre connaît ses premiers soubresauts. Ces conditions demeurent également une interrogation majeure posée par la planétologie comparée. Dans ce contexte, on peut citer quelques unes des nombreuses interrogations qui demeurent en suspends, et pour lesquelles Mars Express devrait fournir des éléments de réponse :

- l'état liquide ou solide est elle présente en grande quantité sous la surface de Mars? Cette question est ou sera abordée par les radars MARSIS/MEX, SHARAD/MRO, et peut-être, dans un futur relativement proche, par des sondages réalisés au moyen de radars à pénétration de sol déposés sur la surface (mission NETLANDER);
- quel est le rôle joué par la vapeur d'eau dans les systèmes atmosphériques martiens actuel et passé, en relation avec la destruction de l'ozone, l'oxydation du CO, et les cycles de condensation/sublimation à partir des calottes polaires? A cette question devraient pouvoir répondre, au moins en partie, les spectromètres SPICAM/MEX et OMEGA/MEX;
- dans quelle mesure les processus d'interaction entre le vent solaire et la haute atmosphère contribuent, et ont contribué, par le biais de l'échappement atmosphérique, à l'échappement et à la perte d'eau et de CO₂ sur des périodes géologiques? Les observations de ASPERA3/MEX et SPICAM/MEX doivent fournir des éléments de réponse.

La variété des processus d'échappement atmosphérique, et de leur efficacité au cours de l'histoire de Mars, rend complexe la construction d'un scénario cohérent à partir des observations importantes, mais trop peu nombreuses, réalisées jusqu'à présent. Nous rentrerons plus en détails dans la description des processus d'échappement au cours de la brève présentation de l'environnement martien qui constitue



le premier chapitre de cette thèse (voir par exemple la chronologie de l'échappement indiquée sur la Figure 1).

FIG. 1: Chronologie schématique de l'échappement atmosphérique martien (Chassefière and Leblanc, 2004). L'arrêt supposé de la dynamo martienne il y a 4.1 ± 0.2 milliards d'années est suivi d'une érosion de son atmosphère alors directement exposée au vent solaire, qui perdure encore à l'heure actuelle.

La couronne de Mars, que l'on appelle également exosphère, est la partie de l'atmosphère située audelà de l'exobase. Le concept d'exobase, sur lequel nous reviendrons, permet d'associer une altitude théorique voisine de 200 km au dessus de la surface, au minimum d'activité solaire, à la zone de transition entre les domaines collisionnel et non collisonnel de la haute atmosphère. La couronne de Mars est composée en majorité d'hydrogène et d'oxygène atomiques. La couronne d'hydrogène, mise en évidence par les spectromètres UV des missions Mariner 6 et 7 (Anderson and Hord, 1971), est formée à partir de l'hydrogène planétaire, en raison de la faible gravité de Mars. On peut, en première approximation, la considérer comme une enveloppe fluide isotherme en équilibre hydrostatique, ce qui permet d'évaluer de façon simple sa densité. L'existence d'une couronne d'atomes d'oxygènes suprathermiques, avec une énergie caractéristique supérieure à 1eV, a été prédite sur Mars, par analogie avec la situation observée sur Vénus lors du passage de la sonde Pionner Venus Orbiter (Bertaux et al., 1978; Nagy et al., 1981). Ces deux planètes partagent en effet une caractéristique commune, celle de l'absence d'un champ magnétique global semblable à celui qui environne la Terre. En 1997, l'expérience MAG-ER de la sonde Mars Global Surveyor a permis de mettre en évidence l'existence d'anomalies magnétiques, associées à un champ crustal figé dans les roches magnétisées avant l'arrêt de la dynamo martienne (Acuña et al., 1998). Mis à part ce champ rémanent, qui conditionne la pénétration de particules ionisées à basse altitude, l'absence d'un champ magnétique à grande échelle entraîne un couplage direct entre la haute atmosphère et le vent solaire, et permet notamment l'accrétion par ce dernier de matière provenant de la couronne.

La mission DYNAMO (Chassefière et al., 2004), rassemblant une vingtaine de laboratoires internationaux, a été proposée dès 2002, à l'initiative de l'Institut Pierre Simon Laplace (IPSL), pour étudier l'échappement et l'évolution de l'atmosphère martienne. Cette mission était fondée sur une charge utile dont les objectifs principaux étaient :

1- d'effectuer une cartographie précise et globale du champ magnétique crustal,

2- d'étudier les couplages entre : (i) la basse atmosphère et la thermosphère (par exemple par le biais des ondes atmosphériques), (ii) la thermosphère et l'ionosphère (à travers la chimie et le transport), (iii) la haute atmosphère et le vent solaire (à travers l'échappement du plasma ionosphérique, la pénétration du vent solaire dans la haute atmosphère, et le criblage de celle-ci par les ions d'origine martienne accrétés et accélérés par l'écoulement du vent solaire). La charge utile comprenait notamment un spectromètre de masse dédié à la caractérisation du plasma thermique et suprathermique de l'ionosphère, à des mesures de composition de la thermosphère, ainsi qu'un analyseur, dédié plus particulièrement à la mesure de la composition et des distributions spatiale, énergétique, et angulaire, des flux de neutres suprathermiques. La proposition de mission MEMO, Mars Escape and Magnetic Orbiter, actuellement discutée dans le cadre du futur programme Cosmic Vision de l'ESA, reprend d'ailleurs les grandes lignes de DYNAMO.

C'est dans ce cadre, et celui des développements instrumentaux réalisés au CETP et au sein du Pôle Système Solaire de l'Institut Pierre Simon Laplace en vue de la préparation du programme d'exploration de Mars, avec un accent particulier sur l'étude de son atmosphère neutre et ionisée et du couplage de cette dernière avec le vent solaire, que cette thèse fut initialement proposée.

La première partie de ce travail a été consacrée à une simulation numérique permettant de décrire la formation de la couronne et l'érosion de la haute atmosphère par l'échappement de ses composés suprathermiques. Après avoir décrit l'environnement de Mars en mettant l'accent sur les caractéristiques qui sont plus directement associées au problème de l'échappement, nous exposons le travail de simulation numérique et de modélisation proprement dit, la méthode et les techniques que nous avons mises en œuvre, ainsi que les principaux résultats obtenus. Nous nous sommes notamment attachés à représenter précisément les processus de recombinaison dissociative et de criblage, responsables de la formation de populations d'atomes et des molécules suprathermiques, et de l'échappement d'éléments atomiques lourds comme l'oxygène et le carbone.

Dans une seconde partie, nous avons abordé le domaine instrumental par l'étude de nouvelles sources d'électrons à effet de champ, qui devraient permettent d'augmenter considérablement le rendement des sources d'ionisation utilisées en spectrométrie de masse spatiale, et de répondre ainsi aux contraintes difficiles que pose la détection de populations de neutres suprathermiques, dont la densité typique est de l'ordre de 10^3 cm⁻³, et dont les énergie résident en grande partie dans une gamme inférieure à environ 10 eV.

La troisième partie est consacrée à la conception proprement dite des sources d'ionisation, à la fois pour un spectromètre associé à des mesures statiques du gaz à la surface de Mars, et pour un spectromètre de masse dédié à la mesure des neutres suprathermiques dans la haute atmosphère. Nous avons également présenté un travail initial de conception du spectromètre de neutres suprathermiques, qui permet de décrire le principe et les caractéristiques principales de deux solutions que nous avons

envisagées pour le tri en masse. En outre, nous avons évalué les performances de cet instrument à partir des résultats des simulations numériques effectuées dans la première partie, et nous donnons un aperçu des caractéristiques observationnelles permettant une différenciation des deux sources non-thermiques étudiées, au moyen de ces mesures in situ.

Enfin, le lecteur trouvera en annexe des résultats complémentaires et certains détails techniques évitant d'alourdir la partie principale. Nous terminons par le nouveau chapitre de la thèse rédigé dans le cadre de l'école Doctorale d'Astrophysique d'Ile de France, qui permet d'aborder ce travail sous l'angle de la gestion de projet.

BIBLIOGRAPHIE

- Acuña, M. H., J. E. P. Connerney, P. J. Wasilewski, H. V. Frey, R. P. Lin, K. A. Anderson, C. W. Carlson, and 13 co-authors, 1998: Magnetic Field at Mars: Preliminary Results of the Mars Global Surveyor Mission. In *Lunar and Planetary Institute Conference Abstracts*.
- Anderson, D. E. and C. W. Hord, 1971: Mariner 6 and 7 ultraviolet spectrometer experiment: Analysis of hydrogen Lyman alpha data. J. Geophys. Res., 76, 6666–6673.
- Bertaux, J. L., J. Blamont, M. Marcelin, V. G. Kurt, N. N. Romanova, and A. S. Smirnov, 1978: Lyman-alpha observations of Venera-9 and 10. I - The non-thermal hydrogen population in the exosphere of Venus. *Planetary and Space Science*, 26, 817–831.
- Chassefière, E., A. Nagy, M. Mandea, F. Primdahl, H. Rème, J.-A. Sauvaud, R. Lin, S. Barabash, D. Mitchell, T. Zurbuchen, F. Leblanc, J.-J. Berthelier, and 36 co-authors, 2004: DYNAMO: a Mars upper atmosphere package for investigating solar wind interaction and escape processes, and mapping Martian fields. *Advances in Space Research*, **33**, 2228–2235.
- Chassefière, E. and F. Leblanc, 2004: Mars atmospheric escape and evolution; interaction with the solar wind. *Planetary and Space Science*, **52**, 1039–1058.
- Nagy, A. F., T. E. Cravens, J.-H. Yee, and A. I. F. Stewart, 1981: Hot oxygen atoms in the upper atmosphere of Venus. *Geophys. Res. Let.*, 8, 629–632.

Première partie

Modélisation de la couronne neutre chaude martienne Before to begin a Hunt It is wise to ask someone What you are looking for Before you begin looking for it. -Winnie the Pooh dans "Pooh's Little Instruction Book", inspiré de A.A. Milne

CHAPITRE 1

L'ENVIRONNEMENT DE LA PLANÈTE MARS

1.1 L'atmosphère neutre

1.1.1 Caractéristiques principales

Les composés majoritaires de l'atmosphère de Mars sont le dioxyde de carbone (95.3%), le diazote (2.7%), et l'argon (1.6%). L'oxygène moléculaire, le monoxyde de carbone, la vapeur d'eau et l'ozone y sont également présents à l'état de trace, en concentrations inférieures ou égales à 0.1% (Owen et al., 1977). La température de surface est proche de 270 à 290K en été du côté jour, et d'environ 140K côté nuit. La pression moyenne de surface est de l'ordre de 7 millibars, avec des variations relativement marquées entre le fond de certains bassins (où elle peut atteindre 9 millibars), et le sommet du volcan Tharsis (1 millibar).

De la surface à environ 50km d'altitude (limite de la troposphère), la température décroît adiabatiquement de 2 à 3K/km (contre 5K/km sur Terre). Entre 50 et 100km, l'atmosphère moyenne, ou mésosphère, possède un gradient de température légèrement négatif, en raison du refroidissement radiatif résultant de l'émission en infra-rouge du CO₂. Cette région encore peu documentée est l'objet d'une attention particulière à l'heure actuelle, grâce aux données récemment obtenues lors d'occultations stellaires par le spectromètre SPICAM, à bord de Mars Express. Ces données vont permettre de préciser les profils de densité et de température du CO₂ (Forget et al., 2006; Bertaux et al., 2005). Au-delà d'environ 100km se trouve la thermosphère. Dans cette région, le refroidissement radiatif dû à la présence de CO_2 est dominé par la conduction thermique (l'énergie issue du chauffage est déposée au niveau de la mésopause). L'absorption de photons EUV/UV solaires entraîne un gradient de température positif qui tend à s'annuler à la base de l'exosphère, voisine de 200km. La thermosphère se caractérise également par une zone de transition, l'homopause, dont l'altitude du côté jour est voisine de 125km, à partir de laquelle l'atmosphère tend vers l'équilibre diffusif dans le champ de gravité. Au-dessous de l'homopause, le rapport de mélange des constituants atmosphériques est homogène, en raison du brassage engendré par les vents et la turbulence ou la convection. Au-dessus, l'homogénéité cesse du fait de la diffusion moléculaire, qui conduit chaque constituant à se distribuer indépendam-



ment des autres, en établissant un équilire diffusif propre, voisin de l'équilibre hydrostatique.

FIG. 1.1: Profils de densité des composés neutres de la haute atmosphère mesurée par les sondes Viking.

La composition de la thermosphère martienne a été mesurée par les spectromètres de masse des sondes de descente Viking 1 et 2 en juillet et septembre 1976 (Nier and McElroy, 1977). Le dioxyde de carbone et le diazote en sont les composés majoritaires entre 100km et 200km (voir la Figure 1.1.1), avec des échelles de hauteur respectivement de l'ordre de 13km et 10km.

Les spectromètres UV des sondes Mariner 6, 7 et 9, ont mis en évidence la présence majoritaire d'hydrogène atomique au-delà de 450km (Anderson and Hord, 1971; Anderson, 1974). Les températures thermosphériques déduites de ces observations varient entre 200K (dans les conditions d'observation de Viking, qui correspondent à un angle zénithal solaire de 44°, et à une activité solaire minimale), et 400K (dans les conditions d'observation de Mariner 6 et 7, qui correspondent à un angle zénithal solaire d'environ 45°, et à une activité solaire maximale).

La stabilité du système atmosphérique martien actuel, dominé par la présence de CO₂, repose globalement sur un équilibre entre le taux de destruction de CO₂ par photodissociation, et le taux de recombinaison de CO avec O, cette dernière réaction étant catalysée par des radicaux hydrogénés tels que H, OH ou HO₂, issus de la photolyse de l'eau en phase vapeur (McElroy, 1972; Nair et al., 1994). Cette dernière joue donc un rôle clé dans l'équilibre du système, malgré sa fraction en masse très minoritaire (environ 0,03% de la masse atmosphérique globale). Si l'essentiel de ce processus semble avéré, les modèles photochimiques actuels souffrent de lacunes et ne permettent pas d'expliquer de manière satisfaisante les abondances observées des composés présents à l'état de traces tels que CO, O, H, H₂O, O₃, ou H₂O₂. Une des difficultés provient de la grande variabilité des cycles chimiques en fonction de la quantité de vapeur d'eau et des conditions de température, qui fluctuent fortement avec les saisons martiennes (beaucoup plus marquées que sur Terre en raison de la forte excentricité de l'orbite) et la présence de poussières, et sont soumis à des gradients méridionaux importants, non pris en compte dans les modèles 1D. Une description complète du système martien nécessite non seulement la prise en compte des processus physico-chimiques propres à chaque milieu, mais aussi des processus de couplage entre les différentes régions de l'atmosphère. Des contraintes fortes existent en outre aux interfaces du domaine atmosphérique. D'une part, le régolithe constitue potentiellement un puits d'oxygène (Lammer et al., 2003) et de carbone (bien qu'actuellement l'absence de carbonates à la surface de Mars pose de sérieuses interrogations à ce sujet). D'autre part, la calotte polaire sud, constituée de glace d'eau, est recouverte d'une fine couche de neige carbonique, qui subit des cycles de condensation-sublimation. Enfin, la haute atmosphère échange des composés chimiques par diffusion avec la mésosphère et la troposphère, et se trouve en interaction directe avec le vent solaire, ce qui peut engendrer un échappement atmosphérique important vers l'espace interplanétaire.

1.1.2 Couplages et perturbations de la haute atmosphère

L'énergie déposée par le rayonnement solaire influence de manière directe et indirecte la composition, la température, et la dynamique de la haute atmosphère, dont le CO_2 absorbe majoritairement le rayonnement EUV/UV. En fonction des saisons et de l'activité solaire les variations du flux EUV incident (de l'ordre de 40% entre l'aphélie et le périhélie en raison de la forte excentricité de l'orbite martienne, et de 100% entre le minimum et le maximum du cycle d'activité solaire) entraînent une expansion ou une contraction hydrostatique de la thermosphère (l'altitude de l'exobase varie d'environ 50km durant le cycle d'activité solaire). Les vents engendrés par les gradients de température entre le jour et la nuit influencent par ailleurs la composition et la température de la thermosphère. Bougher et al. (1999) montrent en particulier que le refroidissement adiabatique provoqué par la présence de vents verticaux côté jour joue un rôle plus important que la conduction thermique sur la régulation en température de la thermosphère.

Cette dernière est couplée dynamiquement à l'atmosphère basse et moyenne par l'effet d'oscillations globales des champs de température, de pression, de vents (etc...) de l'atmosphère (marées). Ces dernières peuvent être d'origine thermique, ou bien liées aux forces gravitationnelles. Dans le cas de Mars l'influence gravitationnelle de soleil et celle des satellites Phobos et Deimos est petite comparée aux effets thermiques. Le lecteur peut se référer à Forbes (2004) qui décrit les principaux mécanismes de marées sur Mars.

Le cycle diurne du chauffage de l'atmosphère basse est dû à l'absorption du rayonnement sur tout le spectre solaire, par le CO_2 (en IR proche), et par les poussières en suspension. Le rayonnement visible absorbé par le sol, dont l'albédo varie en fonction de la présence de poussières en suspension, provoque de larges oscillations de la température de surface, transmises à l'atmosphère par convection ou radiativement. Comme sur Terre les modes d'oscillations dominants sont surtout les modes diurne (dont la période temporelle est de l'ordre de la durée du jour martien) et semi-diurne. La topographie irrégulière de la surface de Mars perturbant le déplacement horizontal des masses d'air excite par ailleurs des modes de propagations verticaux dont la dissipation dans la haute atmosphère influe sur la dynamique de cette dernière.

On peut mentionner également l'influence des ondes de gravité. La gravité agit en effet comme une force de rappel sur les volumes d'air dont le déplacement vertical entraîne des variations de densités. Ces différents types d'ondes produisent des variations de température dans l'atmosphère, le cisaillement des vents, et sont susceptibles de dissiper leur énergie dans la haute atmosphère, qu'elles couplent à l'atmosphère basse où elles prennent naissance. La thermosphère est en outre elle-même soumise à des oscillations de marées dues au chauffage EUV solaire.

Le soulèvement de tempêtes de poussières, que l'on sait capable de voiler entièrement la surface de Mars, engendre un chauffage très important de la troposphère (de l'ordre de 10K) par suite de l'augmentation de l'absorption du rayonnement solaire par les particules en suspension. Ces tempêtes provoquent également un forçage des ondes de gravités qui se propagent verticalement. La sonde Mars Global Surveyor a été témoin d'un de ces évènements localisé dans l'hémisphère sud lors de sa phase d'aérofreinage, son accéléromètre ayant enregistré une augmentation d'un facteur 3 de la densité à 130km, concomitant à une élévation de température de 10 à 15K à 30km (Keating et al., 1998). Ces tempêtes constituent une composante spécifique du climat martien, et la compréhension des mécanismes qui en sont à l'origine est essentielle, puisqu'elle conditionne notamment le succès des futures missions prévoyant un "amarsissage".

1.2 L'ionosphère

1.2.1 Caractéristiques principales

FIG. 1.2: Profils de densité des composés ionisés de la haute atmosphère mesurée par les sondes Viking.

La composition de l'ionosphère diurne a été mesurée par l'expérience d'analyse à potentiel retardateur (RPA) des sondes de descente Viking (Hanson et al., 1977). Comme le montre la Figure 1.2.1, les ions majoritaires sont O_2^+ (environ 90%), CO_2^+ (environ 10%), et O^+ . Les profils de densités présentent un pic de concentration de l'ordre de 2×10^5 cm⁻³, situé à une altitude voisine de 125-130km. La densité du pic décroît en $(cos\chi)^{1/2}$, où χ est l'angle zénithal solaire, alors que son altitude augmente avec ce dernier, conformément à la théorie de Chapman. Une ionosphère nocturne ténue a également été détectée par radio-occultation, notamment lors du passage de Viking, mais uniquement pour des angles zénithaux inférieurs à 120°. De plus, une grande variabilité de la densité du pic ionosphérique, localisé à une altitude voisine de 160km (dépendant de l'angle zénithal), a été observée, avec une valeur moyenne de l'ordre de 5×10^3 cm⁻³.

De même que l'atmosphère neutre, l'ionosphère est sensible aux variations saisonnières du flux solaire incident. La profondeur de pénétration du flux EUV détermine, entre autres, l'altitude du pic. Les saisons martiennes étant très marquées, les températures et densités de la thermosphère varient fortement au cours de l'année. Le modèle de circulation générale thermosphérique du NCAR (National Center for Atmospheric Research) indique une diminution de l'ordre de 15km de l'altitude du pic ionosphérique entre les solstices (130km dans l'hémisphère nord, au périhélie, et 115km dans l'hémisphère sud, à l'aphélie), reflétant les inflations et contractions saisonnières de la basse atmosphère (chauffée par le rayonnement IR), qui influent sur l'altitude de la thermosphère d'été et l'hémisphère d'hiver.

Enfin, les tempêtes de poussières influent également fortement sur l'altitude du pic (Bougher et al., 2000).

Malgré le nombre très limité de mesures in situ de l'ionosphère, de nombreux profils de densités électroniques ont été établis par radio occultation lors des missions successives (Mariner 4, 6, 7, 9; Viking 1 et 2; Mars 4 et 5; MGS). Bougher et al. (2001) montre de manière intéressante des variations d'environ 5km d'amplitude de l'altitude du pic ionosphérique aux hautes latitudes dans l'hémisphère Nord en réponse à des variations de densités de l'atmosphère neutre, consistantes avec la propagation d'ondes de marée thermiques semi-diurnes.

Les températures de l'ionosphère et de l'atmosphère neutre sont du même ordre en dessous de 135km (de 150 à 200K). Au-delà, les températures du plasma thermique sont sensiblement plus grandes que celles de la thermosphère (la température ionique atteint environ 3000K à 300km), ce que le chauffage EUV et la conduction thermique ne permettent pas d'expliquer. Les hypothèses d'un apport d'énergie ad hoc par le vent solaire et/ou d'une conductivité thermique réduite en raison de la présence d'un champ magnétique dans l'ionosphère (issu de la formation d'un empilement des lignes de champ magnétique interplanétaires) ont été avancées pour expliquer ces écarts (Nagy et al., 2004). Hanson and Mantas (1988) ont mis en évidence la coexistence de trois composantes énergétiques distinctes dans la population d'électrons ionosphériques (thermique, suprathermique, vent solaire) à partir des données des analyseurs à potentiel retardateur des sondes Viking. La partie suprathermique (dont la température est estimée à 20000K par ces auteurs) est composée de photoélectrons créés lors de la photoionisation de l'atmosphère neutre, d'une part, et d'électrons du vent solaire accélérés le long de lignes de champ magnétique, d'autre part.

1.2.2 Mécanismes de production et de perte

La production ionique primaire provient de la photoionisation des composés neutres de la thermosphère par des photons UV dont l'énergie est supérieure au seuil d'ionisation (typiquement 13.777eV pour le CO₂, soit $\lambda < 899.22$). L'ionisation par impact électronique et les réactions ions-neutres constituent des sources de production secondaires. Les ions formés sont consommés lors de réactions ions-neutres ou de réactions de recombinaison dissociative (ce type de réaction est abordé dans la partie 2.2.2).

La production ionique est maximale entre 100 et 200km d'altitude. Une analyse détaillée de la production issue de la photoionisation (Witasse, 2000) montre que les ions majoritaires produits sont CO_2^+ , O^+ (majoritaire à partir de 240km), puis CO^+ , C^+ , CO_2^{++} , et enfin H⁺ (majoritaire au-delà de 430km).

Entre 120 et 200 km la photodissociation du dioxyde de carbone et la présence d'oxygène atomique mènent à la production de l'ion O_2^+ qui devient majoritaire. Le schéma réactionnel suivant est une simplification du schéma réel. Le CO₂ est photodissocié par le rayonnement UV de longueur d'onde $\lambda < 899.22$:

$$CO_2 + h\nu \rightarrow CO_2^+ + e^-$$

puis l'ion CO_2^+ disparaît soit par recombinaison dissociative :

$$CO_2^+ + e^- \rightarrow CO + O$$

soit par la réaction avec l'oxygène atomique:

$$CO_2^+ + O \rightarrow O_2^+ + CO$$

qui peut également donner:

$$CO_2^+ + O \rightarrow O^+ + CO_2$$

Les ions O^+ ainsi formés permettent la production d'ions O_2^+ suivant la réaction :

$$O^+ + CO_2 \rightarrow O_2^+ + CO$$

Trop peu d'observations sont disponibles pour identifier les sources d'ions du côté nuit. Comme dans le cas de Vénus, l'ionisation par impact électronique et le transport du plasma du jour vers la nuit peuvent contribuer au peuplement de l'ionosphère nocturne (Brannon et al., 1993; Dobe et al., 1995). On peut aussi invoquer l'observation récente d'aurores qui impliquent l'ionisation locale de la haute atmosphère martienne, et la formation de surdensités locales (Bertaux et al., 2005).

En réalité une quinzaine de réactions faisant intervenir les ions et neutres majoritaires de la haute atmosphère doivent être pris en considération afin de modéliser correctement la production et le transport des espèces, et le chauffage des électrons dans l'ionosphère. Les durées de vie des espèces chimiques deviennent suffisamment grandes au-delà de 200km pour favoriser le transport du plasma.

1.2.3 Transport et échappement du plasma

La photochimie seule permet de reproduire les densités ioniques observées en dessous de 200km d'altitude par Viking (Hanson et al., 1977) (toutefois, certains travaux semblent montrer que les électrons secondaires sont importants et que le transport des ions l'est autant dans cette région (Witasse, 2000)). Au-delà d'environ 200km, les durées de vie des espèces issues de la photochimie deviennent grandes et le transport prédomine.

Comme l'ont montré Chen et al. (1978), puis Fox (1997), l'hypothèse d'un échappement ionique à la frontière supérieure de l'ionosphère doit être formulée afin de reproduire les profils mesurés à haute altitude. Fox (1997) évalue le flux sortant d'oxygène (sous toutes ses formes) à $5.5 \times 10^7 cm^{-2} s^{-1}$ au minimum d'activité solaire et $1.8 \times 10^8 cm^{-2} s^{-1}$ au maximum, valeurs comparables au flux issu de la recombinaison dissociative de O_2^+ (Kim et al., 1998; Hodges, 2000). De plus cet auteur suggère qu'une partie importante de ce flux traverse le terminateur et participe à l'ionosphère nocturne. On peut également ajoutter que la composition des flux prédits par Fox (1997) est nettement différente de celle mesurée par ASPERA-3 (Carlsson et al., 2006), ce qui implique que le dit transport est probablement inhibé.

La prise en compte du champ magnétique induit dans l'ionosphère (Acuña et al., 1998; Cloutier

et al., 1999), ainsi que des anomalies magnétiques de la croûte rendent toutefois la description du transport complexe et son interprétation délicate. En particulier Nagy et al. (2004) rapportent des analyses statistiques montrant que la pression magnétique exercée par le vent solaire sur l'ionosphère est supérieure à la pression thermique de cette dernière 85% du temps. Dans cette configuration le déplacement du plasma incident induit un champ magnétique horizontal dans l'ionosphère, qui inhibe le transport vertical des ions d'origine planétaire. Les modèles de MHD récents (Ma et al., 2002, 2004) permettent de mieux décrire le comportement de l'ionosphère soumise à l'interaction du vent solaire, en l'absence d'un champ magnétique permanent autour de Mars, et de reproduire les effets des champs crustaux et induits sur les densités ionosphériques et l'échappement des ions accélérés par le champ électrique du vent solaire et traversant le terminateur (des valeurs des flux de cet échappement sont fournies au paragraphe suivant).

1.3 L'exosphère

L'exosphère (ou couronne) est la partie la plus externe de l'atmosphère. Dans cette région les collisions entre particules sont si peu fréquentes qu'elles peuvent en général être négligées. La base de l'exosphère, ou exobase, correspond à l'altitude à laquelle le libre parcours moyen d'une particule est égal à l'échelle de hauteur de l'espèce à laquelle elle appartient. La population exosphérique est habituellement séparée en une population à la température de l'exosphère T_{ex} (de l'ordre de 200K pour l'hydrogène atomique au minimum d'activité solaire sur Mars), et une population dite suprathermique, constituée de particules dont l'énergie cinétique est supérieure à $5 \cdot 10 \times T_{ex}$. Contrairement à la Terre ou à Venus, dont la gravité est suffisante pour retenir la couronne suprathermique, une portion importante des particules de la couronne de Mars possède une vitesse plus grande que la vitesse de libération (égale à $\sqrt{\frac{GM}{r}}$ où G est la constante gravitationnelle, M la masse de la planète et r la distance planétocentrique de la particule). Un échappement atmosphérique important en résulte, ce qui a des conséquences majeures sur l'évolution à long terme du contenu de l'atmosphère et par conséquent sur l'histoire de la planète.

Les données UV rapportées par Mariner 6 ont fourni les premières preuves de l'existence d'une couronne d'hydrogène autour de Mars (Anderson and Hord, 1971). Ces données, ainsi que celles de Mariner 7, et 9, font encore référence à l'heure actuelle. La couronne est constituée majoritairement d'hydrogène et d'oxygène atomiques. D'autres composés atomiques tels que l'helium, diffusant à haute altitude, le carbone, ou l'azote, issus de réactions chimiques dans l'ionosphère, sont également susceptibles de s'y trouver. La température de l'exobase diurne passe d'environ 200 à 300K entre le minimum et le maximum d'activité solaire, et son altitude augmente de 200km à envion 250km. L'influence des variations du flux EUV solaire incident est également importante, et se traduit de manière complexe dans la couronne, puisque la couronne d'hydrogène se contracte lorsque d'activité solaire s'intensifie (sa densité à l'exobase passe de 10^6 cm⁻³ au minimum à 3×10^4 cm⁻³ au maximum), tandis que la couronne d'oxygène subit l'effet inverse.

1.3.1 Structure de l'exosphère et mécanismes d'échappement

La théorie des exosphères planétaires et de l'échappement atmosphérique a été élaborée dans les années 1960 (Chamberlain, 1963). Selon cette théorie trois classes de particules peuplent la région située au-dessus de l'exobase, correspondant à trois types de trajectoires : les trajectoires balistiques, les trajectoires satellites (particules liéés gravitationnellement à la planète et dont les trajectoires ne traversent jamais l'exobase), et les trajectoires d'échappement. Les profils de densité de ces populations au-dessus de l'exobase ont été calculés par Chamberlain (1963) à partir de l'équation de Liouville, et des caractéristiques de ces classes de particules. L'origine de ces particules est associée à des processus thermiques et non thermiques dont nous fournissons ici une brève description.

L'échappement d'une particule ascendante à l'exobase est effectif lorsque son énergie cinétique est supérieure à l'énergie potentielle gravitationnelle (l'énergie d'échappement, qui peut être ramenée à une vitesse d'échappement à l'exobase martienne $v_{esc} = 4.8 \text{ km.s}^{-1}$).

L'échappement d'une particule thermique (c'est-à-dire à l'équilibre thermodynamique locale) se produit donc lorsque celle-ci a une énergie supérieure à l'énergie d'échappement. C'est l'échappement de type Jeans, important pour les espèces légères telles que l'hydrogène atomique, mais négligeable pour le carbone atomique et les espèces avec des masses plus grandes. Ce flux calculé à l'exobase pour l'hydrogène atomique est de l'ordre de $10^8 \text{ cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ (voir Lammer et al. (2003) par exemple).

Un cas asymptotique de cet échappement correspond au cas où l'énergie thermique devient très grande (suite à un chauffage EUV très important de l'atmosphère par exemple), de l'ordre de $kT \approx \frac{1}{2}mv_{esc}^2$. L'énergie est alors suffisante pour provoquer l'échappement global de l'atmosphère. C'est l'échappement de type hydrodynamique, dont on suppose qu'il a joué un rôle significatif au cours des premiers centaines de millions d'années de l'histoire de Mars, et a pu également donner lieu à l'échappement des espèces plus lourdes entraînées par le flux s'échappant d'atomes légers (Chassefière and Leblanc, 2004).

Au delà de quelques centaines de millions d'années, les seuls processus pouvant avoir donné lieu à un échappement de ces espèces lourdes sont des processus de type non thermiques.

On distingue principalement trois types de processus non thermiques :

L'échappement de type photochimique, associé à des ions produits dans l'ionosphère par photoionisation et se recombinant avec des électrons (non loin de l'exobase), pour former des espèces pouvant posséder une énergie de quelques eV, parfois supérieure à l'énergie d'échappement. Nous reviendrons en détails sur ce type de réactions dans la section 2.2.2 du chapitre 2. Par exemple, l'oxygène atomique de la couronne de Mars, ainsi que l'oxygène de la couronne de Venus, proviennent de la recombinaison dissociative de l'ion O_2^+ . La recombinaison d'autres ions tels que N_2^+ , CO^+ et CO_2^+ est susceptible de produire des composantes suprathermiques de carbone et d'azote. Mentionnons également que la photodissociation de N_2 et CO pourraient également constituer des sources importantes d'atomes neutres énergétiques (Fox, 1993; Fox and Bakalian, 2001).

L'échappement ionique ou ionosphérique. Les particules neutres de la couronne peuvent être ionisées par photoionisation (EUV), par impact avec des électrons du vent solaire, par échange de charge avec des protons du vent solaire, ou par échange de charge avec des ions du plasma planétaire. Ces ions sont ensuite accélérés par le champ électrique de convection du vent solaire, et peuvent s'échapper avec ce dernier (ils sont alors majoritairement des ions H⁺ et O⁺ dans le cas martien). Par ailleurs, les ions d'origine ionosphérique, produits au dessus de la région d'équilibre photochimique, peuvent également être accélérés par le champ électrique de convection du vent solaire, qui pénètre profondément dans l'ionosphère (Lundin et al., 2004). Ces ions sont alors majoritairement des ions O_2^+ et CO_2^+ . Les modèles récents de d'interaction du vent solaire avec Mars (Ma et al., 2004; Modolo et al., 2005) semblent indiquer une composition majoritaire d'ions O_2^+ pour ce flux d'échappement, avec une faible proportion d'ions O⁺. Les espèces CO_2^+ et CO^+ , fortement présents dans l'ionosphère, devraient également faire partie de ce flux. Aspera-3/MEX a récemment mesuré des flux d'ions dans la queue magnétosphérique de Mars composé d'ions O⁺, puis d'ions O_2^+ , puis d'une composante minoritaire d'ions CO_2^+ (Carlsson et al., 2006).

L'échappement par criblage. Nous reviendrons abondamment sur ce processus dans la section 2.2.1 du chapitre 2. En quelques mots, ce processus d'échappement serait induit par les ions planétaires accélérés par le vent solaire au delà de l'exobase martienne. Ceux-ci, en particulier pour les masses supérieures à l'hélium, possèdent des trajectoires cycloïdales dont le rayon de giration est de l'ordre du rayon de Mars. De ce fait, une partie d'entre eux peut impacter l'atmosphère, et ainsi provoquer par collisions l'éjections de particules possédant suffisamment d'énergie pour s'échapper.

1.3.2 Interaction avec le vent solaire et conséquences sur l'évolution de l'atmosphère

Comme les environnements de la Terre et de Vénus, l'environnement de Mars fait obstacle à l'écoulement du vent solaire. La présence d'un choc planétaire à proximité de Mars, séparant la région d'écoulement du vent solaire autour de l'obstacle, la magnétogaine, du vent solaire lui-même, a été mise en évidence par la sonde Phobos-2. Cependant, comparée à ses sœurs, Mars est la plus directement affectée par le vent solaire, principalement en raison de sa petite taille et de la faible distance entre le choc planétaire, de l'ordre de 1.5 rayons martiens au point subsolaire, et donc situé dans l'exosphère, et son exobase. Cette distance, comparée au rayon de giration des ions du vent solaire, implique que ces derniers interagissent directement avec l'ionosphère, d'une part, et que, comme on l'a dit, les constituants de l'exosphère, ionisés et accrétés par le champ électrique du vent solaire, s'échappent directement en suivant son écoulement.

En tenant de plus compte de l'existence d'un champ crustal induisant la formation de magnétosphères plus ou moins localisées et non uniformément réparties autour de Mars, la configuration d'ensemble de l'environnement magnétique martien apparaît comme particulièrement complexe.

La tableau 1.3.2 tiré de Chassefière and Leblanc (2004) rassemble des taux d'échappement en fonction du temps liés aux différents processus évoqués, estimés par différents auteurs. L'échappement ionosphérique et la recombinaison dissociative apparaissent comme les sources dominantes d'échappement à l'époque actuelle, tandis que l'échappement ionique et le criblage apparaissent comme beaucoup plus efficaces il y a 3.5 milliards d'années, en raison de la diminution d'intensité du vent solaire et du flux EUV solaire incident au cours du temps.

	Present	2.5 Gyr ago	3.5 Gyr ago
Dissociative recombination induced escape (O/s)	6×10^{24a}		
	3.5×10^{25b}	3×10^{25a}	8×10^{25a}
	1×10^{26b}		
Pick-up ion from O corona (O ⁺ /s)	6×10^{24a}		
	3×10^{24e}	4×10^{26a}	3×10^{27a}
	7×10^{23h}	4.0×10^{25e}	8.3×10^{26e}
	3.6×10^{24} f		
Ionospheric escape (O/s)	1×10^{24h}	No estimate available	No estimate available
	$3.7 - 2.6 \times 10^{25 f,h}$		
Sputtering induced escape (O/s)	5×10^{23c}	1.4×10^{26c}	1.8×10^{27c}
	3×10^{24d}	7×10^{26d}	7×10^{27d}
	7×10^{23} g	1.6×10^{26g}	$4.2 \times 10^{27 \text{g}}$

FIG. 1.3: Taux d'échappement de l'oxygène atomique estimés au maximum d'activité solaire par différentes modélisations des principaux mécanismes, en fonction du temps. A l'époque actuelle, la recombinaison dissociative ainsi que l'échappement ionosphérique dominent, tandis que l'échappement ionique et le criblage apparaissent comme beaucoup plus efficace il y a 3.5 milliards d'années.

Dans le cas de Mars, l'enjeu de la quantification de l'échappement sur des périodes géologiques revêt une importance particulière vis-à-vis de la conservation de l'eau dans l'atmosphère et à la surface de la planète, depuis l'arrêt de la dynamo martienne il y a 4.1 milliards d'années. McElroy (1972) sont les premiers à avoir estimé que l'échappement concomitant de l'oxygène et de l'hydrogène pouvait se faire dans des proportions proches de 1:2, c'est-à-dire dans les proportions de la molécule d'eau. Les calculs effectués à l'époque surestimaient l'échappement de l'oxygène, et d'autres mécanismes non thermiques, tels que le criblage, ou les échappements ionique et ionosphérique, furent considérés pour évaluer s'ils étaient susceptibles d'apporter une contribution significative. Cependant, les modèles actuels prenant en compte ces différentes sources semblent toujours indiquer un net déficit du flux d'échappement d'oxygène nécessaire à maintenir ce rapport de 1:2 (Lammer et al., 2003).

L'analyse géomorphologique de la surface de Mars effectuée récemment par Carr and Head (2003) semble indiquer qu'un volume d'eau équivalent à un océan de 150 m d'épaisseur réparti sur toute la surface de la planète a pu se trouver à la surface par le passé. Les modèles actuels d'échappement atmosphérique ne peuvent expliquer la perte que d'environ 10% de cette quantité.

BIBLIOGRAPHIE

- Acuña, M. H., J. E. P. Connerney, P. J. Wasilewski, H. V. Frey, R. P. Lin, K. A. Anderson, C. W. Carlson, and 13 co-authors, 1998: Magnetic Field at Mars: Preliminary Results of the Mars Global Surveyor Mission. In *Lunar and Planetary Institute Conference Abstracts*.
- Anderson, D. E., 1974: Mariner 6, 7 and 9 Ultraviolet spectrometer experiment: Analysis of hydrogen Lyman alpha data. J. Geophys. Res., 79, 1513.
- Anderson, D. E. and C. W. Hord, 1971: Mariner 6 and 7 ultraviolet spectrometer experiment: Analysis of hydrogen Lyman alpha data. J. Geophys. Res., 76, 6666–6673.
- Bertaux, J.-L., O. Korablev, D. Fonteyn, S. Guibert, E. Chassefière, F. Lefèvre, E. Dimarellis, and 22 co-authors, 2005: Global structure and composition of the martian atmosphere with SPICAM on Mars express. Advances in Space Research, 35, 31–36.
- Bougher, S. W., S. Engel, D. P. Hinson, and J. M. Forbes, 2001: Mars Global Surveyor Radio Science electron density profiles: Neutral atmosphere implications. *Geophys. Res. Let.*, **28**, 3091–3094.
- Bougher, S. W., S. Engel, R. G. Roble, and B. Foster, 1999: Comparative terrestrial planet thermospheres 2. Solar cycle variation of global structure and winds at equinox. J. Geophys. Res., 104, 16591–16611.
- Bougher, S. W., S. Engel, R. G. Roble, and B. Foster, 2000: Comparative terrestrial planet thermospheres 3. Solar cycle variation of global structure and winds at solstices. J. Geophys. Res., 105, 17669–17692.
- Brannon, J. F., J. L. Fox, and H. S. Porter, 1993: Evidence for day-to-night ion transport at low solar activity in the Venus pre-dawn ionosphere. *Geophys. Res. Let.*, **20**, 2739–2742.
- Carlsson, E., A. Fedorov, S. Barabash, and . co authors, 2006: Mass composition of the escaping plasma at Mars. *Icarus*.
- Carr, M. H. and J. W. Head, 2003: Basal melting of snow on early Mars: A possible origin of some valley networks. *Geophys. Res. Lett.*, **30**, 3–1.

- Chamberlain, 1963: Planetary coronae and atmospheric evaporation. *Planetary and Space Science*, **11**, p 901.
- Chassefière, E. and F. Leblanc, 2004: Mars atmospheric escape and evolution; interaction with the solar wind. *Planetary and Space Science*, **52**, 1039–1058.
- Chen, R. H., T. E. Cravens, and A. F. Nagy, 1978: The Martian ionosphere in light of the Viking observations. J. Geophys. Res., 83(12), 3871–3876.
- Cloutier, P. A., C. C. Law, D. H. Crider, P. W. Walker, Y. Chen, M. H. Acuña, J. E. P. Connerney, R. P. Lin, K. A. Anderson, D. L. Mitchell, and . co abtours, 1999: Venus-like interaction of the solar wind with Mars. *Geophys. Res. Lett.*, 26, 2685–2688.
- Dobe, Z., A. F. Nagy, and J. L. Fox, 1995: A theoretical study concerning the solar cycle dependence of the nightside ionosphere of Venus. *Journal of Geophysical Research*, **100**, 14507–14514.
- Forbes, J. M., 2004: Tides in the middle and upper atmospheres of Mars and Venus. Advances in Space Research, 33, 125–131.
- Forget, F., S. Lebonnois, M. Angelats I Coll, E. Quemerais, J. L. Bertaux, F. Montmessin, E. Dimarellis, A. Reberac, M. A. López-Valverde, and F. Garcia-Galindo, 2006: Mars atmosphere density and temperatures between 60 and 130 km observed by Mars Express SPICAM stellar occultation. In *Mars Atmosphere Modelling and Observations*, Forget, F., Lopez-Valverde, M. A., Desjean, M. C., Huot, J. P., Lefevre, F., Lebonnois, S., Lewis, S. R., Millour, E., Read, P. L., and Wilson, R. J., editors, 621.
- Fox, J. L., 1993: The production and escape of nitrogen atoms on Mars. J. Geophys. Res., 98, 3297–3310.
- Fox, J. L., 1997: Upper limits to the outflow of ions at Mars: Implications for atmospheric evolution. *Geophys. Res. Let.*, 24, 2901–+.
- Fox, J. L. and F. M. Bakalian, 2001: Photochemical escape of atomic carbon from Mars. J. Geophys. Res., 106, 28785–28796.
- Hanson, W. B. and G. P. Mantas, 1988: Viking electron temperature measurements Evidence for a magnetic field in the Martian ionosphere. J. Geophys. Res., 93, 7538–7544.
- Hanson, W. B., S. Sanatani, and D. R. Zuccaro, 1977: The Martian ionosphere as observed by the Viking retarding potential analyzers. J. Geophys. Res., 82(11), 4351–4363.
- Hodges, R. R., 2000: Distributions of hot oxygen for venus and mars. J. Geophys. Res., 105.
- Keating, G. M., S. W. Bougher, R. W. Zurek, R. H. Tolson, G. J. Cancro, S. N. Noll, J. S. Parker, T. J. Schellenberg, R. W. Shane, B. L. Wilkerson, and . co authors, 1998: The Structure of the Upper Atmosphere of Mars: In Situ Accelerometer Measurements from Mars Global Surveyor. *Science*, 279, 1672.

- Kim, J., A. F. Nagy, J. L. Fox, and T. E. Cravens, 1998: Solar cycle variability of hot oxygen atoms at Mars. J. Geophys. Res., 103(12), 29339–29342.
- Lammer, H., H. I. M. Lichtenegger, C. Kolb, I. Ribas, E. F. Guinan, R. Abart, and S. J. Bauer, 2003: Loss of water from Mars:Implications for the oxidation of the soil. *Icarus*, 165, 9–25.
- Lundin, R., S. Barabash, H. Andersson, M. Holmström, A. Grigoriev, M. Yamauchi, J.-A. Sauvaud, A. Fedorov, E. Budnik, J.-J. Thocaven, D. Winningham, and 34 co-authors, 2004: Solar Wind-Induced Atmospheric Erosion at Mars: First Results from ASPERA-3 on Mars Express. *Science*, 305, 1933–1936.
- Ma, Y., A. F. Nagy, K. C. Hansen, D. L. DeZeeuw, T. I. Gombosi, and K. G. Powell, 2002: Threedimensional multispecies MHD studies of the solar wind interaction with Mars in the presence of crustal fields. *Journal of Geophysical Research (Space Physics)*, 107, 6–1.
- Ma, Y., A. F. Nagy, I. V. Sokolov, and K. C. Hansen, 2004: Three-dimensional, multispecies, high spatial resolution MHD studies of the solar wind interaction with Mars. *Journal of Geophysical Research (Space Physics)*, **109**(A18), 7211–+.
- McElroy, M. B., 1972: Mars: An Evolving Atmosphere. Science, 175, 443–445.
- Modolo, R., G. M. Chanteur, E. Dubinin, and A. P. Matthews, 2005: Influence of the solar EUV flux on the Martian plasma environment. *Annales Geophysicae*, **23**, 433–444.
- Nagy, A. F., D. Winterhalter, and . co authors, 2004: The plasma Environment of Mars. Space Science Reviews, 111, 114.
- Nair, H., M. Allen, A. D. Anbar, Y. L. Yung, and R. T. Clancy, 1994: A photochemical model of the martian atmosphere. *Icarus*, 111, 124–150.
- Nier, A. O. and M. B. McElroy, 1977: Composition and structure of Mars' upper atmosphere Results from the neutral mass spectrometers on Viking 1 and 2. J. Geophys. Res., 82(11), 4341–4349.
- Owen, T., K. Biemann, J. E. Biller, A. L. Lafleur, D. R. Rushneck, and D. W. Howarth, 1977: The composition of the atmosphere at the surface of Mars. J. Geophys. Res., 82, 4635–4639.
- Witasse, O., 2000: *Modélisation des ionosphères planétaires et de leur rayonnement : la Terre et Mars.* Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble.

CHAPITRE 2_

ETUDE DE LA PRODUCTION DE NEUTRES SUPRATHERMIQUES ET DE LEUR ÉCHAPPEMENT DE LA HAUTE ATMOSPHÈRE MARTIENNE

Les atomes et molécules neutres énergétiques constituent une composante des environnements proches des planètes et satellites du système solaire. Dans le cas de Mars, ils revêtent une importance particulière en tant que composante non thermique de l'échappement (e.g. Chassefière and Leblanc (2004)). Ce dernier, ainsi qu'on l'a évoqué au chapitre précédent, pourrait constituer un paramètre clef de l'état moyen d'oxydation de Mars et de l'évolution de son contenu en eau et dioxyde de carbone sur des périodes géologiques (Zhang et al., 1993; Jakosky, 1991). La première partie de ce chapitre fournit une brève revue des populations de neutres suprathermiques dans les environnements des planètes telluriques. Nous décrivons ensuite les aspects physico-chimiques des processus étudiés dans le cas martien, concernant d'une part le criblage atmosphérique, et d'autre part la réaction photochimique de recombinaison dissociative des ions O_2^+ et CO^+ . La suite de ce chapitre est consacrée à la simulation de la création et du transport des espèces suprathermiques dans la thermosphère et dans l'exosphère de Mars, par l'emploi d'une approche particulaire basée sur une méthode de type Monte Carlo, couplée à un modèle de Dynamique Moléculaire. Nous décrivons dans un premier temps le modèle numérique adopté par Leblanc and Johnson (2002) pour la simulation du criblage dans le cas d'une atmosphère moléculaire 1D. Notre étude étant basée sur ce modèle, nous explicitons ensuite les modifications apportées, qui permettent notamment la prise en compte de sources photochimiques, dans une géométrie à symétrie sphérique. Nous présentons enfin une discussion sur les résultats de ces simulations pour les espèces lourdes telles que CO₂ et CO, ainsi que ceux obtenus pour l'oxygène et le carbone atomiques. Quelques perspectives concernant l'amélioration du modèle et l'étude d'autres processus relatifs à l'échappement sont également données.

L'observation de populations suprathermiques a pu être effectuée dans les environnements des planètes telluriques grâce aux techniques de sondage atmosphérique par spectrométrie UV. La modélisation de certaines raies d'émission de l'oxygène atomique (telles que le triplet résonant de OI à 1304 et le sextuplet de OI à 989), détectées par fusée sonde dans la thermosphère a permis de déduire l'existence d'une géocouronne d'oxygènes chauds, dont la température fut estimée à T=4000K (Cotton et al., 1993). Sur Vénus c'est la raie d'émission Lyman α mesurée par Mariner 5 et 10 (Barth, 1971a; Takacs et al., 1980) qui indiqua la présence d'hydrogène chaud dans l'exosphère, par ailleurs confirmée grâce aux observations optiques de Venera 9 (Bertaux et al., 1978). Le triplet résonant de OI à 1304 fut d'autre part détecté lors de la mission Pioneer Venus Orbiter (PVO), et associé à une population d'oxygènes chauds (Nagy et al., 1981). Paxton (1983) établirent la présence de carbone énergétique dans l'exosphère de Venus à partir des données de PVO. Dans le cas de Mars, la couronne d'hydrogène fut observée pour la première fois par les spectromètres UV des sondes Mariner 6 et 7 (Nagy and Cravens, 1988). Les raies de l'oxygène atomique à 1304 et 1356 apparurent également dans le spectre UV de Mariner 6 Barth (1971b), jusqu'à 700km dans le cas de O 130.4 nm. L'oxygène chaud n'a cependant encore jamais été clairement identifié (notons que les instruments actuellement embarqués sur Mars Express ne permettent pas d'envisager une mesure par spectrométrie UV au-dessus de 400km, ou par imagerie d'ENA dans une gamme inférieure à 100eV). Mentionnons également que la couronne d'hydrogène neutre a été récemment détectée, dans des conditions de minimum solaire cette fois, par l'instrument SPICAM (Leblanc, communication personnelle).

Les neutres suprathermiques présents dans les environnements des planètes telluriques sont issus en grande partie de processus communs à ces objets dont les compositions thermosphériques et ionosphériques présentent des similarités. En particulier les ionosphères de ces planètes comportent toutes trois une concentration d'ions O_2^+ non négligeable. Les effets de ces processus dépendent dans chaque cas de l'absence ou de la présence d'un champ magnétique permanent modifiant l'interaction du corps avec le vent solaire. Dans cette section nous passons rapidement en revue et de manière non exhaustive les processus de nature non thermique présents dans les environnements de ces objets, de manière à replacer dans un cadre plus général l'approche développée au cours de ce travail, et ses applications potentielles notamment sur le plan instrumental.

Si l'on adopte une classification des processus selon la gamme d'énergie des particules qu'ils engendrent, on trouve par ordre croissant les processus de nature photochimique, à l'œuvre dans la thermosphère et l'ionosphère, le criblage (dans le cas des corps non magnétisés), dont l'efficacité est maximale au voisinage de l'exobase, et les processus d'échange de charge, actifs notamment dans les régions d'interfaces entre l'atmosphère neutre et les particules chargées du vent solaire (par exemple dans l'exosphère de Vénus et de Mars).

Dans les ionosphères de Vénus et de Mars, la réaction de recombinaison dissociative, évoquée en introduction (dont celle de l'ion O_2^+ détaillée au paragraphe 2.2.2) est une source majeure d'oxygènes chauds peuplant la couronne. Dans l'ionosphère terrestre, les réactions de recombinaison dissociative

impliquant les ions O_2^+ et NO⁺, mais aussi les collisions entre les espèces ioniques ou atomiques suprathermiques et l'oxygène atmosphérique atomique, constituent les sources les plus importantes de l'oxygène atomique suprathermique observé (Gérard et al., 1995). L'exothermicité de ce type de réaction est typiquement de l'ordre de quelques eV, fournissant une énergie translationnelle du même ordre aux atomes produits (jusqu'à 3.5eV pour l'oxygène issu de la recombinaison dissociative de O_2^+).

Plusieurs modèles numériques d'exosphères ont été développés au cours des 30 dernières années pour chacune de ces planètes parmi lesquels on peut citer de manière non exhaustive Yee and Hays (1980); Shematovich et al. (1994); Bisikalo et al. (1995) pour la Terre, Nagy and Cravens (1988) pour Vénus, et Nagy and Cravens (1988); Lammer and Bauer (1991); Hodges (2000) pour Mars. Tous ces modèles considèrent la réaction de recombinaison dissociative comme une des sources principales d'atomes neutres énergétiques.

Lorsqu'elles sont produites au voisinage de l'exobase, les particules dont les vitesses sont dirigées vers l'espace peuvent former une couronne d'autant plus étendue que la gravité du corps est faible. Elles peuvent même, lorsque leur énergie cinétique à l'exobase est supérieure à l'énergie gravitationnelle s'échapper définitivement du champ gravitationnel de l'objet planétaire dont elles sont issues. Dans le cas martien environ 32% des particules produites par recombinaison dissociative de O_2^+ possèdent une vitesse supérieure à la vitesse de libération à l'exobase (de l'ordre de 2eV). Dans le cas de Vénus le canal le plus énergétique de la recombinaison dissociative de O_2^+ produit des atomes d'oxygène dont l'énergie ne représente que 63% de l'énergie d'échappement à l'exobase (soit 5.5eV).

En l'absence partielle ou globale d'un champ magnétique, des ions se trouvant dans la couronne peuvent être accrétés et accélérés par le champ électrique de convection du vent solaire et réimpacter l'atmosphère au niveau de l'exobase, produisant ainsi par transfert de quantité de mouvement une population énergétique d'atomes et de molécules. Ce processus qui porte le nom de criblage a été étudié en particulier dans le cas de Mars (comme on le verra au paragraphe 2.2.1) dont l'interaction avec le vent solaire est directement liée à la question de l'échappement et de la présence d'eau liquide au Noachien (Luhmann et al., 1992; Kass and Yung, 1995). Le champ magnétique de la Terre protège notre atmosphère d'une érosion directe sous l'action de ce processus, en revanche, dans le cas de Venus, dépourvue comme Mars d'un champ magnétique intense à grande échelle, le criblage peut se produire de manière identique à Mars (Watson et al., 1980). Toutefois les échelles spatiales impliquées (position du choc planétaire, rayon de gyration des ions du plasma solaire) entraînent que le dépôt de l'énergie incidente dans la haute atmosphère est beaucoup moins direct que dans le cas martien. L'énergie des ions incidents à l'exobase, issus directement ou indirectement du vent solaire, atteint plusieurs keV, ce qui va entraîner la production lors de collisions de particules dont les énergies atteignent plusieurs centaines d'eV. Toutefois comme on le verra au paragraphe 2.4.3 le flux produit à de telles énergies reste de plusieurs ordres de grandeur inférieur à l'essentiel de la production, située aux basses énergies, typiquement en dessous de 20eV.

Les réactions d'échange de charge possèdent une grande importance dans les environnements des corps non magnétisés du système solaire. En effet les protons du vent solaire peuvent interagir directement avec les composés neutres des couronnes de ces objets. Au cours de ces réactions un ion énergétique (proton solaire, ion O^+ créé dans la couronne) est neutralisé par un atome neutre de la



FIG. 2.1: Création d'un atome neutre énergétique par réaction d'échange de charge entre un proton suivant une ligne de champ magnétique et atome d'oxygène neutre.

couronne, qui lui cède un électron, comme l'illustre la Figure 2.1 dans le cas d'un échange de charge entre H^+ et O. Cette réaction se produit sans transfert de moment significatif, tant que l'énergie de l'ion incident est suffisamment grande (typiquement plus grande que 10eV pour l'oxygène). Le résultat de cet échange de charge est la production d'un atome neutre dont l'énergie initiale, qui peut atteindre plusieurs keV, est pratiquement conservée, et d'un nouvel ion de basse énergie. Dans l'environnement martien les protons solaires sont neutralisés en produisant des ions H^+ et O^+ , principalement, étant donné la composition de la couronne. Des ions énergétiques d'origine planétaire, tels que les ions O^+ produits à partir des neutres de la couronne, peuvent également être neutralisés par échange de charge avec d'autres neutres coronaux. Associé aux autres processus d'ionisation des constituants neutres de la couronne (photoionisation, impact électronique), ce processus entraîne le changement de composition du plasma au voisinage de la planète, ce qui a également des conséquences sur l'écoulement de ce dernier.

Les réactions d'échanges de charge ont été prises en compte dans différents modèles de la formation de la couronne de Venus et de Mars (Hodges, 2000; Zhang et al., 1993), et de l'interaction du vent solaire avec Mars (Luhmann and Kozyra, 1991; Modolo et al., 2005).

2.2 Sources de neutres suprathermiques dans l'atmosphère martienne

2.2.1 Le criblage de l'atmosphère par des ions énergétiques

La description théorique des effets du criblage (en anglais sputtering) dans le cadre de l'étude des interactions entre des particules énergétiques (neutres ou ionisées) et les surfaces solides ou les atmosphères des corps du système solaire doit beaucoup à l'analyse de Johnson (1990), dont nous reprenons ici les grandes lignes. Le criblage est un processus de production d'éjectats (atomes et/ou molécules), résultant d'un transfert d'énergie entre un flux de particules incidentes et les constituants d'une atmosphère ou d'une surface solide. L'énergie des particules incidentes est déposée par transfert d'impulsion dans des cascades collisionnelles avec les constituants du milieu, ou par excitation électronique. De telles interactions peuvent entraîner un chauffage du milieu impacté, des réactions chimiques, l'implantation d'ions dans le matériau de surface, et provoquer l'éjection d'atomes ou de molécules de ce milieu.

Ces deux régimes de criblage sont illustrés sur la Figure 2.2, par la distribution du nombre de
FIG. 2.2: Rendement du criblage d'une surface de glace d'eau maintenue à 77K, par des ions O^+ ou S^+ (axe de gauche), et H^+ (axe de droite) (Johnson and Leblanc, 2001).



molécules éjectées par ion incident en fonction de l'énergie incidente, dans le cas d'une surface de glace bombardée par des ions O^+ , S^+ , et H^+ . Comme l'illustre la Figure 2.2 le type de criblage dépend de l'énergie des ions incidents. Le pic étalé aux grandes énergies est caractéristique de l'excitation électronique et de l'ionisation (on parle alors de criblage électronique), tandis que le plateau pour des énergies entre 10 et 100eV/amu correspond à une éjection induite par transfert d'impulsion. De plus la nature du matériau soumis au bombardement entre également en jeu: les constituants des surfaces de glaces des satellites joviens, provenant de la condensation de gaz et de sels minéraux à basse température possèdent des énergies de liaisons moins élevées que les surfaces de nature réfractaire (Mercure ou la Lune), et sont en outre moins conductrices que ces dernières, ce qui facilite le chauffage et la désorption par excitation électronique.



FIG. 2.3: Représentation schématique du criblage d'une atmosphère à l'exobase. L'éjection d'une particule atmosphérique par une particule incidente avec un angle θ peut être directe (cas 1), ou bien résulter d'une cascade de collisions lorsque le transfert d'impulsion se produit non loin de l'exobase et que le vecteur vitesse de la particule énergétique produite est dirigé vers le haut (cas 2).

Pour les surfaces de nature réfractaire et les atmosphères des planètes, c'est le terme collisionnel qui prédomine. Dans ce cas l'éjection d'une particule peut résulter d'une collision directe avec une particule incidente (cas 1 de la Figure 2.3), ou bien d'une cascade de collisions qui au voisinage de l'exobase peut engendrer des particules dont les vecteurs vitesses sont dirigés vers le haut, comme l'illustre le cas 2 de la Figure 2.3. L'éjection directe est d'autant plus efficace que l'angle d'incidence θ par rapport au nadir est élevé (la particule arrive en incidence rasante sur l'atmosphère).

Le rendement du criblage Y, définit comme le nombre de particules éjectées par particule incidente, peut s'exprimer analytiquement comme la somme de deux termes :

$$Y \approx c_1(\theta) \frac{\sigma(T > U)}{\sigma_d} + c_2(\theta) \frac{\alpha \beta S_{tm}}{U \sigma_d}$$
(2.1)

dont le premier (indice 1) est la composante liée à l'éjection directe et le second (indice 2) la composante liée à l'éjection issue des cascades collisionnelles. Ces termes dépendent de l'angle θ de la particule incidente par le biais des coefficients c_1 et c_2 , de la section efficace de collision $\sigma(T > U)$ entre les particules incidentes et les constituants du milieu, pour les particules incidentes transférant une énergie T supérieure à l'énergie d'échappement U à l'exobase, de la section efficace de collision σ_d entre les espèces à l'exobase, de la section efficace d'arrêt du milieu S_{tm} , définit par $S_{tm} = \frac{1}{n} (dE/dl)_{tm}$ où (dE/dl) est l'énergie perdue dans le milieu par unité de longueur par transfert d'impulsion et n la densité du milieu, et de deux coefficients α et β . Chacune des deux contributions au rendement total Y exprime intrinsèquement le rapport entre deux distances, qui sont le libre parcours moyen d'une particule incidente pour transférer à une particule du milieu une énergie T plus grande que l'énergie d'échappement U, et le libre parcours moyen d'une particule pour s'échapper du milieu. Le coefficient α permet de tenir compte de l'anisotropie de dépôt d'énergie dans le milieu, fonction notamment de l'angle d'incidence des particules. Le coefficient β est directement lié à la forme de la distribution d'énergie des particules mises en mouvement lors des cascades de collisions. Une formulation de cette dernière fut initialement proposée par Thompson (1968) pour exprimer le nombre de particules mises en mouvement avec des énergies comprises entre E et E+dE, par une particule incidente d'énergie E_i . Cette distribution s'écrit :

$$f(E) = \frac{\beta E_i}{E^2} \tag{2.2}$$

où le facteur β dépend principalement de l'angle et de l'énergie des particules incidentes, et faiblement de la section efficace de collision (Johnson, 1990).

La Figure 2.4 illustre la nature des différents flux de particules énergétiques interagissant avec l'environnement de Mars dans une configuration idéale du champ magnétique interplanétaire $\mathbf{B}_{\mathbf{w}}$, orthogonal au vecteur vitesse du vent solaire $\mathbf{v}_{\mathbf{w}}$.

Les données recueillies par les instruments ASPERA (spectromètre de masse ionique) (Lundin et al., 1990), TAUS (analyseur d'énergie) (Thompson, 1991) et SLED (Cravens et al., 2002) lors du survol de Mars par la sonde Phobos-2 (1988) ont permis de déceler la présence d'ions O^+ (et O_2^+) dans la magnétogaine. Par ailleurs les données de l'instrument IMA (Ion Mass Analyzer) à bord de la sonde Mars Express ont récemment permis d'identifier la présence d'un flux d'ions planétaires composé de O^+ , O_2^+ , et CO_2^+ (Carlsson et al., 2006). Ces ions peuvent provenir en partie de l'ionisation des atomes



FIG. 2.4: L'environnement martien est soumis à différents flux de particules énergétiques, tels que le vent solaire, ou bien des radiations ionisantes. (crédit : François Leblanc, Service d'Aéronomie).

neutres de la couronne par des photons EUV, par des électrons du vent solaire, ou par des réactions d'échange de charge, mais également de l'échappement ionosphérique. Cette dernière source semblerait la plus probable étant donné les abondances en ion CO_2^+ du flux détecté. Toutefois, les conclusions de Carlsson et al. (2006) lorsqu'elle compare les prédictions de Fox (1997) avec ces mesures semblent justement suggérer que l'échappement ionosphérique participe, mais n'est pas majoritaire.

La plasma incident à l'exobase de Mars est majoritairement constitué des ions du plasma solaire (principalement H^+ et He^+ (5%)) et des ions produits dans la couronne neutre par photoionisation, impact électronique, et échange de charge. Ces derniers (principalement H^+ et O^+) peuvent être accrétés et accélérés par le champ électrique du vent solaire. Dans ce cas ils sont dénommés ions *pick-up*.

Protons et particules alpha ne contribuent pas efficacement au criblage, en raison de leur faible masse par rapport à la masse des particules présentes dans la haute atmosphère (CO₂, et O), d'une part, et de la déflection importante de leurs trajectoires due à un rayon de giration plus petit que celui des ions O^+ , d'autre part.

En effet le mouvement des ions dans la magnétosphère martienne dépend essentiellement de la direction du champ électrique de convection $\mathbf{E} = -\mathbf{v_w} \times \mathbf{B_w}$ et du champ magnétique \mathbf{Bw} du vent solaire, et se traduit par des trajectoires cycloïdales. Le rayon de gyration des ions au voisinage de Mars dans le cas où la direction du champ magnétique interplanétaire est perpendiculaire à la direction de vitesse du vent solaire est proche de 1500km pour les ions H⁺ et de 6000km pour des ions O⁺ (en supposant une énergie de 1keV et une valeur communément admise de 3nT pour le champ magnétique).

Le rayon des protons est comparable à la distance entre le choc planétaire et l'exobase, de l'ordre de 1700km dans le cas de Mars au point subsolaire (Vignes et al., 2000). Les valeurs de ces rayons indiquent que les ions du plasma incident peuvent déposer leur énergie directement dans la haute atmosphère de la planète (pour comparaison dans le cas terrestre le choc est situé à environ 65000km et le rayon de gyration des protons est de l'ordre de 360km). En particulier, de tels ions accrétés et accélérés par le champ électrique sont donc susceptibles d'impacter l'atmosphère, entraînant l'éjection de particules par criblage.

Des modèles numériques d'interaction du vent solaire avec Mars ont été utilisés (Luhmann and Kozyra, 1991) et plus récemment (Modolo et al., 2005) pour fournir une estimation des flux d'ions pick-up O⁺ formés dans l'exosphère et retraversant l'exobase de Mars.

Notre modèle de formation de la couronne utilise ces flux comme données pour la simulation du criblage. Nous donnons donc ici un aperçu de la manière dont ils ont été obtenus.

FIG. 2.5: Evolution des taux d'échappement de O et CO_2 en fonction de temps depuis la formation du système solaire (O Gyr), pour trois processus sources : criblage (sputtering), échappement ionique (pick-up ions), et échappement provenant de la recombinaison dissociative de O_2^+ (exospheric).



Zhang et al. (1993) ont calculé des modèles thermosphériques et ionosphériques de Mars (densités, températures) relatifs à plusieurs époques du système solaire, en se basant sur l'évolution du flux EUV solaire moyen qui est une fonction décroissante de l'âge du système solaire. Ces travaux décrivent trois périodes, correspondant à des intensités du flux EUV solaire égales à 6, 3, et 1 fois la valeur actuelle dans le cas d'une activité solaire minimale. Selon le modèle d'évolution solaire de Zahnle and Walker (1982), il est possible d'associer à ces périodes les datations respectives de 1, 2, et 4.7 milliards d'années depuis la formation du système solaire. Dans le modèle employé par Zhang et al. (1993) la température thermosphérique et les densités des espèces dans la thermosphère aux différentes périodes sont calculées à partir de l'équilibre entre le chauffage de l'atmosphère par des photons EUV, UV, et IR, les pertes par émission du CO_2 à $15\mu m$, et la conduction thermique moléculaire (la conduction turbulente est négligée dans la thermosphère). La production de l'ion O_2^+ est calculée aux différentes époques à partir de la photodissociation de CO_2 , qui dépend directement du flux solaire EUV incident. Ainsi les modèles atmosphériques adaptés à l'activité EUV solaire au cours du temps ont permis d'évaluer les flux et densités de l'oxygène atomique produits par la recombinaison dissociative de O_2^+ , entre l'exobase et 5000 km. Luhmann et al. (1992) ont utilisé les densités d'oxygène chaud calculées par Zhang et al. (1993) en entrée d'un modèle de type particulaire (Luhmann and Kozyra, 1991) pour simuler la formation d'ions pick-up O⁺, en prenant en compte les taux de photo-ionisation, d'échange de charge, ou d'ionisation par impact électronique des neutres de la couronne. Les trajectoires des ions sont ensuite suivies dans un domaine de champ magnétique $\mathbf{B}_{\mathbf{w}}$ et électrique $\mathbf{E} = -\mathbf{v}_{\mathbf{w}} \wedge \mathbf{B}_{\mathbf{w}}$ à proximité de Mars (supposant $\mathbf{v}_{\mathbf{w}}$ et $\mathbf{B}_{\mathbf{w}}$ perpendiculaires). Les intensités de ces champs dans la magnétogaine ont été estimées par ces auteurs à partir d'une approche fluide basée sur un modèle du type dynamique des gaz, développé par Spreiter and Stahara (1980). Leurs calculs ont permis de quantifier les flux d'ions pick-up O⁺ dirigés vers l'exobase, et de mettre en évidence la contribution importante du criblage à l'échappement atmosphérique en simulant leur impact sur une atmosphère atomique 1D à partir des formulations analytiques du début de cette section (équation 2.1).

La Figure 2.5 tirée de Luhmann et al. (1992) montre l'évolution du taux d'échappement de l'oxygène atomique et du CO_2 en fonction du temps pour les différentes sources d'échappement (la notation "exospheric" correspond à l'échappement dû à la recombinaison dissociative de O_2^+). L'échappement de l'oxygène atomique de type photochimique domine à l'époque contemporaine (située à 4.7 milliards d'années sur la figure) et dans des conditions proches du minimum d'activité solaire, tandis que l'échappement lié au criblage s'avère plus efficace il y a environ 3.7 milliards d'années. La perte d'oxygène estimée par ces auteurs sur 3.7 milliards d'années est traduite en une quantité d'eau équivalente à un océan d'une profondeur de 50m. Leblanc and Johnson (2002) ont par la suite utilisé les valeurs de flux incident d'ions pick-up O⁺ de Luhmann et al. (1992), sur une thermosphère constituée de molécules représentatives de la composition de l'atmosphère martienne, afin d'évaluer le rendement du criblage et la perte nette d'eau, aux périodes définies par Zhang et al. (1993) (6, 3, et 1EUV). Leurs calculs aboutissent à une perte d'eau équivalente à un océan d'environ 15m de profondeur sur 3.7 milliards d'années.

Comme on l'a évoqué le modèle hybride 3D développé par Modolo et al. (2005), qui décrit les structures du choc planétaire et de la barrière d'empilement magnétique, a permis de quantifier la formation d'ions pick-up O^+ , et d'en reconstruire la répartition spatiale (qui s'avère fortement asymétrique et dépendant de l'orientation du champ électrique de convection). Ces résultats sont basés sur une description hybride 3D de l'interaction du vent solaire avec Mars, suivant une approche cinétique pour les ions, et fluide pour les électrons (dont la masse est négligée). Une telle approche s'avère nécessaire pour rendre compte des effets cinétiques associés aux ions d'origine planétaire ou solaire dont on a vu que les rayons de gyration typiques sont du même ordre que le rayon de la planète (Brecht, 1997), et fournir une description de la structure de la zone de choc dans laquelle se produit la décélération du vent solaire et de la zone d'empilement des lignes du champ magnétique interplanétaire. A partir de ces flux d'ions pick-up, les distributions énergétiques et angulaires des atomes neutres énergétiques incidents à l'exobase de Mars ont ainsi pu être réévaluées (Modolo et al., 2004).

Au cours du présent travail nous avons donc utilisé le flux de neutres énergétiques incidents calculé par Modolo et al. (2004), qui correspond au cas où l'activité solaire est minimum. L'ordre de grandeur de ce flux est de $5.9 \times 10^{23} \ part.s^{-1}$, soit légèrement supérieur aux $5 \times 10^{23} \ part.s^{-1}$ de Luhmann et al.



FIG. 2.6: Distributions d'énergie des ions pick-up O^+ calculées par Luhmann et al. (1992) (trait plein) et Modolo et al. (2004) (pointillés), au minimum d'activité solaire, et au maximum d'activité solaire (tirets).



FIG. 2.7: Distributions angulaires des ions pick-up O^+ calculées par Luhmann et al. (1992)(trait plein) et Modolo et al. (2004) (pointillés), au minimum d'activité solaire (tirets), et au maximum d'activité solaire.

(1992). Dans des conditions où l'activité solaire est maximum, l'intensité du flux EUV est environ le double de celle observée au minimum. De ce fait afin d'obtenir une approximation du flux incident d'ions pick-up nous avons effectué une moyenne arithmétique entre les valeurs de flux à 1EUV et 3EUV calculé par Luhmann et al. (1992), ce qui donne $3.6 \times 10^{25} \ part.s^{-1}$. Luhmann and Kozyra (1991) ont par ailleurs montré que les ions pick-up incidents sont neutralisés dans des réactions d'échange de charge, et ce bien avant d'atteindre l'exobase. Par conséquent nous considérons que les particules incidentes interagissent pour la plupart avec l'atmosphère via des collisions neutre-neutre. Cela étant Lundin et al. (2004) ont récemment observé du plasma d'origine solaire jusqu'au péricentre de Mars Express situé à une altitude de 270km. De ce fait une description plus précise du flux impactant l'exobase en terme de proportion ions/neutres pourrait être envisagée. Les distributions énergétiques et angulaires des particules neutralisées incidentes que nous avons employées sont représentées sur les Figure 2.6 et 2.7. Le spectre en énergie s'étend entre 10eV (valeur fixée arbitrairement car à de telles énergies l'efficacité d'éjection est très réduite (Johnson et al., 2002)), et 17keV (valeur supérieure au cas de Luhmann et al. (1992) en raison du champ électrique **E** mieux décrit).

Au cours des simulations les particules énergétiques pénétrant la frontière supérieure du domaine collisionnel (située à une altitude de 400km au minimum d'activité solaire et de 500km au maximum d'activité solaire) sont suivies jusqu'à ce que:

- leur trajectoire traverse la limite basse de la thermosphère (110km), où elles sont considérées comme thermalisées par le gaz atmosphérique dense, ou,
- l'énergie perdue au cours des collisions devienne plus petite qu'une fraction donnée de l'énergie d'échappement, à l'altitude de la particule (typiquement 0.04eV pour l'oxygène atomique soit ¹/₂₀ de l'énergie d'échappement à 270km), ou,
- la particule soit éjectée du domaine collisionnel et s'échappe, ou,
- la particule sorte du domaine de calcul limité à 2 rayons martiens (au-delà la probabilité de photoionisation, avant un éventuel retour à l'exobase, devient très importante).

Dans la suite de cette partie nous abordons les réactions de type photochimique que nous avons considérées, telle que la recombinaison dissociative de l'ion O_2^+ , déjà proposée par McElroy (1972) comme responsable du peuplement de la couronne neutre par l'oxygène énergétique, et jouant un rôle prépondérant du point de vue de l'échappement non thermique de l'atmosphère de Mars.

2.2.2 La recombinaison dissociative

Le spectre en émission de l'oxygène atomique a été largement utilisé comme source d'informations pour étudier la dynamique et la chimie de l'ionosphère terrestre (e.g. Takahashi et al. (1990); Cotton et al. (1993)). La figure la plus spectaculaire de ce spectre demeure la raie verte à 557.7nm, qui correspond à la transition radiative $O({}^{1}S) \rightarrow O({}^{1}D)$, visible par exemple lors des aurores boréales. Le mécanisme de recombinaison dissociative de O_{2}^{+} fut proposé dès 1931 comme principale source de production des atomes $O({}^{1}S)$ dans l'atmosphère (Kaplan, 1931). Dans l'atmosphère terrestre le pic de densité de cet ion moléculaire se situe vers 200km, dans la couche F de l'ionosphère. Sur Vénus la recombinaison dissociative de O_2^+ intervient de manière similaire (la gravité étant plus élevée que celle de Mars, les atomes formés ne s'échappent que très peu) et le calcul des densités d'oxygène exosphériques à partir des observations effectuées en spectrométrie UV par PVO fut réalisé par Nagy et al. (1981) et Nagy and Cravens (1988) (avec la prise en compte des réactions d'échange de charge). Dans le cas de Mars les mesures in situ réalisées par les analyseurs à potentiel retardateur (RPA) des sondes Viking (Hanson et al., 1977) ont permis de dresser les profils d'altitude des ions O_2^+ , CO_2^+ , et O^+ de l'ionosphère diurne, pour un angle zénithal solaire proche de 44°. Des simulations de la recombinaison dissociative des ions moléculaires majoritaires de l'ionosphère martienne, tels que O_2^+ (Fox and Hać, 1997; Kim et al., 1998; Hodges, 2000), CO⁺ et CO₂⁺ (Fox and Hać, 1999; Nagy et al., 2001; Fox, 2004) ont en effet permis d'estimer les densités de l'oxygène et du carbone chauds dans la haute atmosphère et d'étudier la formation de la couronne. Fox and Hać (1997) ont également calculé le fractionnement isotopique de l'azote provenant de l'échappement de l'azote martien induit par la recombinaison dissociative des N₂⁺.

La détermination des taux de réactions et des rapports de branchement de la recombinaison dissociative fait également l'objet de nombreuses études expérimentales et théoriques (Peverall et al., 2001), qui ont permis d'améliorer la modélisation de ces processus atmosphériques.

De façon générale l'interaction entre un ion moléculaire AB^+ et un électron peut conduire à quatre types de réaction : la recombinaison radiative $(AB^+ + e^- \rightarrow AB + h\nu)$, l'excitation dissociative $(AB^+ + e^- \rightarrow A^* + B^+ + e^-)$, la formation d'une paire d'ions $(AB^+ + e^- \rightarrow A^- + B^+)$, et la recombinaison dissociative $(AB^+ + e^- \rightarrow A^* + B^*)$. Bien que la recombinaison dissociative soit un processus clé des atmosphères planétaires et plus généralement des milieux stellaires et interstellaires, la physico-chimie des atmosphères s'enrichit également des autres processus puisque par exemple dans des conditions où les électrons possèdent des énergies supérieures à 15eV (ordre de grandeur de l'énergie des électrons du vent solaire), la section efficace de la réaction d'excitation dissociative pour les ions NO⁺, O⁺₂, ou N⁺₂, semble dominer d'un ordre de grandeur celle de la recombinaison dissociative (Sheehan and St-Maurice, 2004).

La recombinaison dissociative est une collision entre un électron d'énergie cinétique E_e (généralement grande par rapport à celle de l'ion que l'on néglige ici) et un ion positif AB⁺ possédant une énergie vibrationnelle E_{ν} .

La capture de l'électron par l'ion mène à un état neutre métastable noté AB^{**} , susceptible de se dissocier rapidement en deux atomes A^* et B^* , emportant chacun une partie du surplus énergétique provenant de la rupture de la liaison entre A et B (on se place dans le cas où la réaction est exothermique):

$$AB^+ + e^- \leftrightarrow AB^{**} \to A^* + B^*$$

La collision évolue vers une dissociation obéissant au principe de conservation de l'énergie totale du système ion+électron, telle que: $E = E_e + E_{\nu} = E_{diss} + E_{cin}$ ou E_{diss} est la limite asymptotique de l'énergie potentielle de l'état dissocié (cf. Figure 2.8), et E_{cin} l'énergie cinétique des atomes A et B produits.

Le diagramme de la Figure 2.8 représente l'énergie potentielle du système ionique AB⁺, en fonction



FIG. 2.8: Diagramme simplifié d'énergie potentielle et de recouvrement des fonctions d'onde de l'ion moléculaire AB^+ , et de l'état neutre instable (répulsif) AB^{**} .

de la distance de séparation internucléaire. Un de ses niveaux d'excitation vibrationnelle, noté ν , est également représenté. Du fait que l'ion moléculaire AB⁺ n'est pas indéfiniment extensible lorsque la distance internucléaire augmente, son énergie potentielle atteint un plateau correspondant à la limite de dissociation E_{diss} . L'énergie potentielle de l'état neutre de transition AB^{**} ne possède pas de minimum local. Ce système peut théoriquement rompre son instabilité en évoluant de deux façons : soit il se désexcite spontanément par ré-émission de l'électron (son énergie potentielle tend alors vers la limite $E_{diss}(A+B^+)$), soit il se dissocie (son énergie potentielle tend alors vers la limite $E_{diss}(A+B^+)$).

La description exacte de la structure énergétique d'un tel système fait appel à la mécanique quantique. Rappelons brièvement que les fonctions d'ondes associées aux états vibrationnels d'un atome ou d'une molécule vérifient l'équation de Schrödinger, dont la résolution permet de calculer les états d'énergies propres du système. L'énergie des états vibrationnels d'une molécule est quantifiée et obéit à la loi suivante :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \tag{2.3}$$

où n est un entier naturel, \hbar la constante de Planck réduite, et ω la pulsation associée à l'oscillateur diatomique constitué par l'ion AB⁺. Le carré du module des fonctions d'onde correspondant à un état d'énergie donné représente la densité de la probabilité de présence du système dans cet état. Les variations des probabilités de présence associées aux systèmes AB⁺ et à AB^{**} en fonction de la distance de séparation internucléaire sont représentées de manière simplifiée sur la Figure 2.8. La section efficace de recombinaison dissociative σ est liée au recouvrement des fonctions d'onde vibrationnelle de l'état ionique initial et de l'état neutre excité par l'intermédiaire du facteur de Franck-Condon (noté FC), suivant une expression de la forme :

$$\sigma = \left(\frac{\Gamma}{E}\right)(FC)(S) \tag{2.4}$$

Le facteur de Franck-Condon (noté FC) décrit le recouvrement des fonctions d'onde vibrationnelle de l'état ionique initial et de l'état neutre excité, et donne la probabilité de transition entre ces deux

états. Γ est la largeur de la capture dite "résonnante" qui décrit l'intensité avec laquelle se produit le processus de capture de l'électron par l'ion, E est l'énergie cinétique de l'électron incident, et S est un facteur désignant la probabilité que la recombinaison soit stabilisée par dissociation plutôt que par réémission d'un électron. La section efficace de dissociation est donc maximale lorsque le recouvrement des fonctions d'ondes est maximal, ce qui est traduit sur la Figure 2.8 par la superposition des densités de probabilités des deux systèmes, qui se produit pour une distance de séparation représentative de l'ion AB⁺ d'énergie interne E_{ν} . L'expression (2.4) montre également que la section efficace diminue lorsque l'énergie de l'électron augmente, ainsi les populations d'électrons favorisant la recombinaison dissociative au sein des atmosphères sont les photoélectrons thermiques.

Dans le cas de la recombinaison dissociative de O_2^+ , la section efficace de dissociation augmente avec l'excitation vibrationnelle de l'ion (Sheehan and St-Maurice, 2004). Il est utile de souligner que chaque espèce moléculaire possède un diagramme énergétique ion-neutre spécifique, et que l'influence de l'excitation vibrationnelle d'un ion sur la section efficace de la recombinaison dissociative n'est pas généralisable.

La recombinaison dissociative des ions O_2^+ avec des électrons produit des atomes d'oxygène selon les 5 canaux énergétiques suivant :

$$O_{2}^{+} + e^{-} \rightarrow O(^{3}P) + O(^{3}P) + 6.99eV(0.22)(C1)$$

$$\rightarrow O(^{1}D) + O(^{3}P) + 5.02eV(0.42)(C2)$$

$$\rightarrow O(^{1}D) + O(^{1}D) + 3.06eV(0.31)(C3)$$

$$\rightarrow O(^{1}D) + O(^{1}S) + 0.84eV(0.05)(C4)$$

$$\rightarrow O(^{3}P) + O(^{1}S) + 2.80eV(<0.01)(C5)$$

(2.5)

dont les rapports de branchement indiqués entre parenthèses ont été mesurés par Kella et al. (1997), pour des ions O_2^+ se trouvant dans leur état électronique fondamental (avec $\nu = 0$) et lorsqu'ils possèdent une vitesse relative nulle par rapport aux électrons.

Les mesures des taux de réactions et des rapports de branchement s'effectuent en pratique dans des anneaux de stockages (accélérateurs de particules) selon deux méthodes principales (Sheehan and St-Maurice, 2004), l'une employant un sondage de type Langmuir dans un plasma de post décharge générant les populations d'ions et d'électrons, et l'autre une technique de faisceaux ionique et électronique croisés éventuellement couplée à un contrôle de la vitesse relative des ions et des électrons. Dans ce dernier cas les neutres produits par la réaction peuvent être détectés par un système d'imagerie (galette à microcanaux par exemple). Les limitations actuelles de ces mesures proviennent de la méconnaissance de la répartition des états vibrationnels des ions impliqués, liée à la difficulté technique de contrôler cette répartition dans l'expérience. Les mesures se produisent alors en général au bout d'un temps suffisamment long pour permettre la relaxation de l'ion O_2^+ vers son état fondamental (Peverall et al., 2001).

Les résultats de Kella et al. (1997) ont été obtenus en employant la technique des faisceaux croisés. Pour interpréter leurs mesures les auteurs considèrent une population ionique décrite par six niveaux vibrationnels ($\nu = 0$ à 5) et une distribution de Boltzmann indépendante pour les niveaux rotationnels. L'énergie relative entre les ions et les électrons produits dans l'expérience est quasi-nulle. Dans ce cas les auteurs obtiennent des rapports de branchement qu'ils associent d'une part au niveau fondamental (ceux indiqués entre parenthèses dans (2.5), et employés dans la plupart des modèles) et d'autre part au mélange des autres niveaux. On peut mentionner une étude récente de Petrignani et al. (2005) dans laquelle les auteurs sont parvenus à isoler les trois premiers états vibrationnels de l'ion O_2^+ ($\nu = 0, 1$, et 2), et fournissent pour chacun d'eux les rapports de branchement de la recombinaison dissociative obtenus au cours de leur expérience. Il sera intéressant d'incorporer ces résultats à notre description de la recombinaison dissociative dans le futur.

Peverall et al. (2001) ont par ailleurs récemment mesuré les rapports de branchement associés aux canaux de la recombinaison dissociative, en fonction de l'énergie cinétique relative Er entre les ions et les électrons, pour Er comprise entre 0 et 0.3 eV. Dans cette expérience les ions O_2^+ sont produits dans leur état vibrationnel fondamental ($\nu = 0$).

La Figure 2.9 montre l'interpolation que nous avons effectuée des rapports de branchement mesurés par Peverall et al. (2001) dans la gamme d'énergie considérée, et permet de comparer la probabilité de chaque canal à celle déduite des mesures de Kella et al. (1997).



FIG. 2.9: Evolution des rapports de branchement des canaux C1 à C4 en fonction de l'énergie relative des ions O_2^+ et des électrons : C1 - tirets, C2 - pointillés, C3 - ligne continue, C4 tirets et points ; Les courbes correspondant aux interpolations des mesures effectuées par Peverall et al. (2001). Les valeurs mesurées par Kella et al. (1997) sont : 0.22 pour C1, 0.42 pour C2, 0.31 pour C3, 0.05 pour C4.

Afin d'étudier l'effet de ces variations sur la production d'oxygènes neutres dans l'atmosphère nous avons incorporé cette dépendance dans notre modèle, ce qui a notre connaissance n'a jamais été fait auparavant. Ceci nous permet, en fonction de l'énergie relative déduite des profils de températures ionosphériques en fonction de l'altitude, d'associer à chaque canal un rapport de branchement ajusté. Dans moins de 7% des cas, l'énergie relative entre ions et électrons atteint toutefois des valeurs légèrement supérieures à 0.3eV. Lorsque cela se produit, à défaut d'informations plus pertinentes, les rapports de branchement que nous affectons aux canaux de réactions sont ceux correspondants à la limite supérieure de l'intervalle d'énergie, c'est-à-dire 0.3eV. Concernant la modélisation de ce processus dans les atmosphères planétaires, les limitations actuelles proviennent de la méconnaissance des distributions vibrationnelles des ions O_2^+ dans l'atmosphère. L'exothermicité de la réaction dépend à la fois de l'état vibrationnel des ions impliqués (un quantum vibrationnel supplémentaire entraîne une augmentation de 0.23eV de l'énergie libérée (Fox and Hać , 1997)), et des températures ionique et électronique (Kabin and Shizgal, 2002).

Nombre d'auteurs (Fox and Hać , 1997; Kim et al., 1998; Hodges, 2000) ont utilisé les rapports de branchement mesurés par Kella et al. (1997) pour simuler la recombinaison dissociative de O_2^+ , supposé dans son état électronique fondamental dans l'atmosphère.

Fox and Hać (1997) ont calculé les distributions vibrationnelles des ions O_2^+ à l'exobase de Mars, Vénus et la Terre, à partir des réactions prépondérantes de création de cet ion qui sont, dans le cas de Mars, $O^+ + CO_2 \rightarrow O_2^+ + CO$ et $CO_2^+ + O \rightarrow O_2^+ + CO$. Le réarrangement du peuplement des niveaux vibrationnels de O_2^+ lors de collisions avec des neutres (tels que l'oxygène atomique par exemple) est aussi pris en compte. Cette distribution vibrationnelle est ensuite utilisée par Fox and Hać (1997) pour simuler par une technique de type Monte Carlo la production d'oxygènes chauds par recombinaison dissociative et évaluer la distribution des vitesses des isotopes de l'oxygène produits. Dans cette simulation les auteurs tiennent comptent des vitesses relatives des ions et des électrons en supposant une température ionique de 400K et électronique de 2000K à l'exobase dans ces conditions proches de Viking 1. Ils tiennent également compte de l'excitation rotationnelle de l'ion O_2^+ (qui s'avère ne pas jouer de rôle significatif sur les distributions de vitesses obtenues). Enfin pour contourner la limitation des rapports de branchement non résolus vibrationnellement mesurés par Kella et al. (1997), ils emploient dans la moitié des cas, pour lesquels ils estiment que l'ion O_2^+ se trouve dans un état d'énergie vibrationnel $\nu > 0$, les rapports de branchement donnés dans Kella et al. (1997) dans le cas du mélange de niveaux vibrationnels.

FIG. 2.10: Distribution des vitesses de l'oxygène produit par recombinaison dissociative de O_2^+ à l'exobase de Mars Fox and Hać (1997)



Citons enfin l'approche analytique proposée par Kabin and Shizgal (2002). Celle-ci établit la distribution des vitesses post-collisionnelles des produits de réaction en fonction des températures des réactifs (ici O_2^+ et e^-) et de l'exothermicité associée à chaque canal (qui dépend elle-même des états vibrationnels des réactifs). En particulier ce travail donne une expression intégrale de la variation temporelle de la distribution des produits en un point de l'espace. Utilisant la même distribution vibrationnelle que Fox and Hać (1997) et l'approximation des rapports de branchement obtenus par Kella et al. (1997) pour l'état fondamental, les auteurs obtiennent un bon accord avec Fox and Hać (1997). Ce travail intéressant fournit les moyens de calculer les variations avec l'altitude de la distribution qui nous intéresse.

Le taux de production de la recombinaison dissociative de O_2^+ que nous avons utilisé est celui mesuré par Mehr and Biondi (1969), le plus largement accepté. Il est en excellent accord avec les mesures les plus récentes de Sheehan and St-Maurice (2004) pour O_2^+ dans l'état fondamental, soit :

$$\alpha = \begin{cases} 1.95 \times 10^{-7} (300/T_e)^{0.7} \ cm^3 . s^{-1}, & 300K \le T_e \le 1200K, \\ 0.75 \times 10^{-7} (1200/T_e)^{0.56} \ cm^3 . s^{-1}, & 1200K \le T_e \le 5000K. \end{cases}$$
(2.6)

Par ailleurs les directions des vitesses des atomes produits sont considérées comme isotropes, à défaut d'informations spécifiques sur la dépendance angulaire des produits de la recombinaison dissociative.

La quantification de l'échappement du carbone atomique est essentielle pour établir l'inventaire du CO_2 au niveau planétaire, la présence massive de ce gaz il y a 4 milliards d'années ayant pu favoriser le maintien de l'eau liquide à la surface de la planète. Le CO provenant de sa photodissociation intervient de plus dans les processus menant à la destruction photochimique de l'eau dans l'atmosphère (voir par exemple Nair et al. (1994), Hodges (2002)). La photodissociation de CO (mentionnée au paragraphe 2.5.2.1), apparaît comme la source principale de l'échappement du carbone, devançant la recombinaison dissociative de CO⁺ (Nagy et al., 2001). Afin d'étudier la formation d'une couronne carbonée et l'échappement de cet élément, nous avons intégré la recombinaison dissociative de l'ion CO⁺, dans un premier temps, pour des raisons de similarité avec le cas d'O₂⁺, d'une part, et parce que la production est directement comparable à celle provenant du criblage, d'autre part. La recombinaison dissociative de CO⁺ s'effectue suivant les canaux énergétiques suivants:

$$CO^{+} + e^{-} \rightarrow C(^{3}P) + O(^{3}P) + 2.90eV(C1)$$

$$\rightarrow C(^{1}D) + O(^{3}P) + 1.64eV(C2)$$

$$\rightarrow C(^{3}P) + O(^{1}D) + 0.94eV(C3)$$

$$\rightarrow C(^{1}S) + O(^{3}P) + 0.22eV(C4)$$

$$\rightarrow C(^{1}D) + O(^{1}D) - 0.33eV(C5)$$
(2.7)

L'énergie d'échappement du ${}^{12}C$ à l'exobase étant de 1.48eV, seul le canal (C1) est susceptible de produire de façon significative une population participant à l'échappement. Les rapports de branchement correspondants sont ceux mesurés par Rosen et al. (1998) dans l'état vibrationnel fondamental de CO⁺, par une technique de faisceaux croisés, et pour des énergies cinétiques relatives entre les ions et les électrons allant de 0.0 à 0.4eV. Ces valeurs pour les canaux C1 à C5 sont respectivement : 0.761, 0.145, 0.094, et 0.0, lorsque l'énergie relative est nulle (dans ce cas le canal endothermique n'est pas possible), et 0.53, 0.34, 0.08, 0.0, et 0.05 lorsque l'énergie relative est de 0.4eV. Comme dans le cas de O_2^+ , l'énergie relative est calculée dans nos simulations en fonction de l'altitude à partir des profils de température donnés dans Kim et al. (1998). Les rapports de branchement sont ensuite interpolés linéairement entre les valeurs de 0 à 0.4eV. Nous utilisons également le taux de réaction généralement admis mesuré par Rosen et al. (1998) :

$$\alpha = 2.75 \times 10^{-7} (300/T_e)^{0.55} \ cm^3 \ s^{-1} \tag{2.8}$$

On peut mentionner au passage que Fox and Hać (1999) ont calculé les distributions d'énergie des produits en fonction de l'altitude, en tenant compte des états vibrationnels de l'ion CO⁺. Malheureusement nous n'avons pas pu bénéficier de ce genre de données.

La composante suprathermique de la couronne martienne s'enrichit également des produits d'autres réactions impliquant notamment l'azote (NO⁺ et N_2^+). Etant donné le caractère expérimental et le temps imparti à cette étude, nous nous sommes naturellement limité dans un premier temps à la production des atomes les plus abondants tels que l'oxygène et le carbone, significatifs par leur influence directe sur l'évolution atmosphérique globale à long terme. Concernant le carbone, notons qu'une étude récente de Fox (2004) montre que la recombinaison dissociative de CO_2^+ est responsable d'une grande partie du carbone atomique chaud présent dans la thermosphère (l'exothermicité de la réaction est trop faible pour lui procurer une énergie supérieure à l'énergie d'échappement).

2.3 Modélisation numérique des processus

2.3.1 Modèles atmosphériques

Nos calculs sont basés sur les modèles thermosphériques et ionosphériques également utilisés par Kim et al. (1998), d'une part, et Krasnopolsky (2002), d'autre part (Figure 2.11). Les sorties de nos simulations peuvent ainsi être comparées avec les principaux travaux réalisés par nos prédécesseurs, Kim et al. (1998), Hodges (2000) et Krestyanikova and Shematovich (2005), qui emploient des modèles atmosphériques similaires pour la recombinaison dissociative, et par ailleurs avec ceux de Leblanc and Johnson (2002), pour le criblage.

Les paramètres de l'atmosphère neutre de Kim et al. (1998) (densité et température), au minimum d'activité solaire, sont dérivés des profils calculés par Fox and Dalgarno (1979) à partir des mesures de Viking 1. A la différence de Kim et al. (1998) notre modèle inclut également les profils de CO provenant de Fox and Dalgarno (1979) en plus de ceux de O et CO₂. Les densités ionosphériques d'O₂⁺ sont déduites par Kim et al. (1998) des mesures de l'analyseur à potentiel retardateur (RPA) de Viking 1 (Hanson et al., 1977). La température électronique provient des calculs de Rohrbaugh et al. (1979) effectués à partir des observations de Hanson et al. (1977). Au maximum d'activité solaire, nous utilisons de même que Kim et al. (1998) les sorties du Mars Thermospheric General Circulation Model de Bougher, S.W., and H. Shinagawa (1998), qui décrit l'atmosphère neutre (à 2.5°N de latitude et pour un TL=1500, c'est-à-dire un angle zénithal solaire (AZS) de 45°).

Le modèle de Krasnopolsky (2002) est un modèle 1D construit pour résoudre les équations de continuité considérant 11 espèces de neutres (formées à partir de CO_2 , N_2 , Ar, H_2 , et HD) et 18 espèces ioniques (parmi lesquelles CO_2^+ , O^+ , CO^+ , C^+ , N_2^+ , N^+ , Ar^+ , H_2^+ , H^+ , et He⁺). Cette approche permet



FIG. 2.11: Modèles atmosphériques utilisés dans notre simulation au minimum et au maximum d'activité solaire. La thermosphère est composée de O, CO_2 , et CO. L'ionosphère comprends l'ion majoritaire O_2^+ ainsi que l'ion CO^+ . Lignes tiretées: modèle de Kim et al. (1998) au minimum et au maximum d'activité solaire (cas (Smax, eroded)). Le profile de CO que nous avons utilisé provient de Fox and Dalgarno (1979). Lignes continues: modèles calculés par Krasnopolsky (2002), au minimum et au maximum d'activité solaire. Les profiles ionosphériques de CO^+ (pointillés) sont tirés de Fox (2004).

de reproduire les conditions rencontrées lors des observations du deuterium avec le HST (Krasnopolsky et al., 1998), ainsi que les observations de H₂ par le satellite FUSE (Krasnopolsky and Feldman, 2001) et par les sondes Mariner 6 and 7 (Anderson and Hord, 1971). Les conditions correspondantes au minimum d'activité solaire dans ce modèle sont similaires à celles rencontrées lors des mesures effectuées par les sondes Viking ($T_{\infty} = 200K$), et au maximum solaire elles sont proches de celles rencontrées par les sondes Mariner 6 and 7 ($T_{\infty} = 350K$). Une différence importante avec le modèle utilisé par Kim et al. (1998) concerne l'angle zénithal solaire (AZS), proche de 60°, pour lequel les modèles atmosphériques sont fournis.

Ces différents modèles sont complétés par les profils de densité de l'ion CO^+ issus du modèle de Fox (2004), correspondant à un AZS proche de 60° .

Les conditions zénithales solaires étant différentes pour chacun de ces modèles, nous prendrons soin lors de la présentation des résultats de rappeler ces conditions dans chaque cas en raison de l'influence très importante du contenu atmosphérique sur les densités des neutres suprathermiques calculées dans l'exosphère.

2.3.2 Modèle physique et approche adoptée pour la simulation

Les approches numériques généralement suivies pour simuler la formation et le transport des espèces dans les exosphères planétaires sont :

- les méthodes de résolution des équations du transport stationnaire des flux hémisphériques $\Phi^+(E, z)$ (ascendant) et $\Phi^-(E, z)$ (descendant) (Nagy and Cravens, 1988; Zhang et al., 1993; Kim et al., 1998), où les équations linéaires couplées des variations de ces flux avec l'altitude (fonctions des sections efficaces de collisions) sont résolues sur un domaine énergétique et spatial discrétisé (jusqu'à l'exobase puisque au-delà les collisions sont négligeables),
- les méthodes de résolution directe de l'équation de Boltzmann (employant par exemple un schéma aux différences finies), utilisées pour décrire localement les fonctions de distributions des espèces perturbant un gaz atmosphérique à l'équilibre thermodynamique local (e.g. Kabin and Shizgal (2002); Balakrishnan et al. (2000)),
- les méthodes particulaires basées sur une approche de type Monte-Carlo (e.g. Hodges (2000);
 Leblanc and Johnson (2001); Krestyanikova and Shematovich (2005)).

La théorie cinétique des gaz permet la description physique du domaine exosphérique. En dessous de l'exobase, la thermosphère est en régime collisionnel. Au-dessus de l'exobase, les trajectoires des particules sont purement balistiques et pour des particules neutres sont entièrement déterminées par la force de gravitation. Une théorie non collisionnelle des exosphères a été développée par Chamberlain (1963), basée sur une classification des particules selon les trajectoires qu'elles suivent dans l'exosphère. En se plaçant dans l'espace des vitesses il est en effet possible de montrer que les trajectoires suivies par les particules appartiennent à différentes sections de coniques, en fonction de leur énergie initiale et de leur moment angulaire.

La Figure 2.12 donne un représentation du partitionnement de l'espace des vitesses dans le plan (Vr,Vt) selon cette classification. Le cercle de rayon égal à la vitesse d'échappement V_{esc} à l'altitude r où se trouve la particule (sur la figure $r = 2.5r_c$, où r_c est l'altitude de l'exobase) délimite les régions de l'espace où les particules suivent des trajectoires elliptiques (intérieur du cercle), de celles où elles suivent des trajectoires hyperboliques (extérieur du cercle). Les hyperboles représentent l'ensemble des vitesses tangentes à la sphère de rayon r_c . Les particules dont les trajectoires traversent l'altitude critique r_c ont des vitesses situées entre les hyperboles (partie du plan contenant l'origine). Celles dont les trajectoires ne coupent jamais r_c ont des vitesses situées à l'extérieur du cercle et à l'intérieur des hyperboles. Celles dont les vitesses situé à l'extérieur du cercle et à l'intérieur des hyperboles. Celles dont les trajectoires à la planète, et dont les trajectoires ne traversent jamais le niveau critique, couvrent le domaine des vitesses à l'extérieur du cercle.



FIG. 2.12: Partitionnement de l'espace des vitesses indiquant les différentes classes de particules dans l'exosphère non collisionnelle, selon le modèle de Chamberlain (1963). Le graphique est tracé pour des particules situées à une altitude $r = 2.5r_c$.

En particulier les expressions analytiques des densités de chacune de ces classes de particules ont été calculées par Chamberlain (1963), en faisant l'hypothèse que la population exosphérique possède une distribution Maxwellienne à l'exobase, puis en intégrant cette fonction dans les domaines de vitesses et d'angles correspondant à chaque classe de trajectoires.

Par la suite des approches collisionnelles (dont on peut trouver une revue dans Fahr and Shizgal (1983)) ont été adoptées, afin :

- d'étudier les effets non Maxwelliens au voisinage de l'exobase,
- de considérer le traitement du domaine de transition dans lequel le libre parcours moyen est de l'ordre de l'échelle de hauteur,
- d'étudier les populations de particules satellites,
- d'étudier l'échappement provoqué par des sources non thermiques.

La représentation numérique du régime de transition n'est pas triviale. Un traitement cohérent de la zone de transition entre la thermosphère et l'exosphère demande en particulier de tenir compte de la thermalisation des espèces par collisions, de leur diffusion aux différentes altitudes, et de leur échappement. C'est typiquement dans ce domaine de transition que les particules sont susceptibles d'atteindre une vitesse supérieure à la vitesse de libération. Diverses tentatives basées sur la théorie cinétique ont été proposées pour fournir dans certaines conditions des solutions de l'équation de Boltzmann tenant compte du caractère non-Maxwellien des populations dans la zone de transition. C'est d'ailleurs une problématique classique dans de nombreux domaines et notamment en astrophysique, par exemple pour la formation du vent solaire. La méthode toutefois la plus employée actuellement pour déterminer les fonctions de distribution des espèces dans l'exosphère consiste à recourir à un schéma probabiliste de type Monte-Carlo, que nous allons détailler maintenant. Si on note f_i la fonction de distribution de l'espèce énergétique i, et $\mathbf{r_i}$ et $\mathbf{v_i}$ les vecteurs position et vitesse des particules

de l'espèce i dans l'espace des phases, l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\frac{\delta f_i}{\delta t} + (\mathbf{v_i} \cdot \mathbf{grad_r}) f_i + \left(\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \mathbf{grad_v}\right) f_i = \int \int \left[f_i^a f_j^{M^a} - f_i f_j^M\right] \sigma(g, \Omega) g d\Omega dv_j - \int \int \left[f_A f_B - f_C f_i\right] \sigma^*(g, \Omega) g d\Omega dv_B$$
(2.9)

Le terme de gauche qui représente les variations dans l'espace des phases de la fonction de distribution est associé au transport de l'espèce *i*. La somme des forces **F** ne comprend ici que la composante liée à la gravitation. Le terme de droite correspond à la description des collisions. L'intégrale de gauche représente le terme de collisions binaires élastiques entre les espèces *i* et *j*, où *j* est une espèce atmosphérique de distribution maxwellienne f_j^M . La vitesse relative entre *i* et *j* est $\mathbf{g} = \mathbf{v_j} - \mathbf{v_i}$, et la section efficace de collision différentielle dans l'angle solide Ω est notée $\sigma(g,\Omega)$. Les pertes $f_i f_j^M$ et les gains $f_i^a f_j^{M^a}$ sont comptés pour les particules dont les vitesses appartiennent à l'intervalle $[\mathbf{v_i}, \mathbf{v_i} + \mathbf{dv_i}]$, les indices *a* se référant aux conditions antérieures aux collisions. L'intégrale de droite décrit les collisions de type "réactives" entre des espèces de distributions f_A et f_B , au cours desquelles des particules énergétiques de l'espèce i peuvent être créées, du type :

$$A + B \longrightarrow C + i^*$$

Lors de ces réactions des particules de l'espèce i peuvent être produites avec suffisamment d'énergie pour s'échapper. Les solutions stationnaires de cette équation peuvent être obtenues par une approche particulaire de type Monte-Carlo (voir par exemple Nanbu (2000)). Dans cette approche la fonction de distribution est approchée par une somme de poids w_i associés à chaque particule dans l'espace des phases :

$$f(r, v, t) \approx \Sigma_i w_i(t) \delta(r - r_i(t)) \delta(v - v_i(t))$$

où les $\delta(r, v)$ désignent les distributions de Dirac des coordonnées de la particule *i* dans l'espace des phases. La résolution numérique du système repose alors sur un algorithme de décomposition : on calcule dans un premier temps le terme de transport des particules, pendant un intervalle de temps donné, ce qui revient à calculer les trajectoires des particules en connaissant leur position, vitesse, et la force appliquée; au pas de temps suivant, on utilise un schéma du type Monte-Carlo pour calculer l'effet des collisions (partie la plus coûteuse en temps de calcul), puis on itère ce processus. A chaque cycle les particules changent de position dans l'espace des phases, les poids restant inchangés. L'intérêt majeur de ce type de méthode est d'imiter le processus de collisions dans le gaz réel, et en particulier d'assurer la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. Le bruit numérique associé est en revanche important, mais décroît lorsqu'on augmente le nombre de particules dans la simulation, et lorsqu'on moyenne les résultats instantanés pris à intervalles réguliers.

Leblanc and Johnson (2002) ont adopté une approche particulaire associée à une méthode de Monte-Carlo pour étudier l'effet des dissociations moléculaires sur le rendement du criblage de la thermosphère martienne suivant un schéma 1D planaire. Dans leur travail le schéma de type Monte Carlo décrit auparavant est couplé à un modèle de Dynamique Moléculaire décrivant précisément l'issue des collisions impliquant des molécules (dissociations, répartition de l'énergie) en fonction des énergies associées (énergie incidente, énergie interne des molécules (vibration), potentiels d'interaction), et des distances caractéristiques (distances inter-atomiques, paramètres d'impact). Nous avons travaillé à partir de ce code numérique dans deux directions : d'une part, afin de compléter la modélisation actuelle de la formation de la couronne de Mars ; d'autre part afin de préciser les spécifications d'un spectromètre de masse dédié à la détection in situ des neutres chauds issus des processus considérés. Les étapes que nous avons suivies ont donc été :

- de faire évoluer la géométrie plane du code de Leblanc and Johnson (2002) vers une géométrie sphérique, et d'inclure le cas de sources photochimiques telles que la recombinaison dissociative,
- d'effectuer des simulations dans des conditions de maximum et de minimum d'activité solaire, afin de déterminer et de comparer de manière cohérente les caractéristiques des processus nonthermiques de criblage et de photochimie,
- de donner une description de la structure de la couronne à haute altitude (jusqu'à 6000km) en terme de densités, de distribution des vitesses et taux d'échappement incluant les espèces O, C, CO, et CO₂ au minimum et au maximum d'activité solaire,
- d'établir les spécifications de l'analyseur de neutres chauds (HNA) décrit au chapitre 7 de la partie III.

2.3.3 Domaine de calcul

Dans notre simulation la thermosphère est divisée en une zone collisionnelle et une zone noncollisionnelle. Le domaine collisionnel s'étend de 110km à 400km d'altitude. La limite supérieure est fixée arbitrairement, bien au-dessus de l'exobase (dont l'altitude est environ de 200km au minimum d'activité solaire et de 225km au maximum). Dans ce domaine d'altitudes la thermosphère est composée de trois constituants : O, CO₂, et CO, dont les densités et températures au minimum et au maximum d'activités solaires correspondent soit au modèle de Kim et al. (1998), soit à celui de Krasnopolsky (2002). Les profils thermosphériques (et ionosphériques) ne dépendent que de la distance planétocentrique en raison de la symétrie sphérique adoptée. L'atmosphère est alors divisée en 30 cellules dans la direction radiale, suivant une distribution exponentielle des altitudes permettant la conservation approximative du nombre de particules atmosphériques par cellule. Le domaine non-collisionnel s'étend entre 400km et 2 rayons martiens (au-dessus de la surface). L'atmosphère y est divisée en cellules dont les frontières sont linéairement espacées de 100km. Notons que le taux d'ionisation moyen d'un atome d'oxygène par des photons UV au niveau de l'orbite martienne est de l'ordre de $3 \times 10^{-7} s^{-1}$ (Huebner et al., 1992), ce qui permet d'estimer pour l'oxygène chaud une durée de vie largement supérieure aux périodes orbitales des atomes autour de Mars, même à plusieurs milliers de kilomètres au-dessus de la surface. Par conséquent, seule l'action de la gravité sur les particules est considérée. Les fonctions de distribution des espèces suivies $(O, C, CO \text{ et } CO_2)$ ainsi que leurs profils de densité et d'énergie cinétique sont déterminées sur la grille, par accumulation de valeurs instantanées de ces grandeurs

pendant un temps $n_p \Delta t$ où Δt est le pas de temps de calcul et n_p un paramètre ajustable, ce qui signifie par exemple que la vitesse moyenne $\langle v \rangle$ est obtenue par un calcul du type:

$$\langle v \rangle = \frac{\sum_i v \Delta t}{\sum_i \Delta t}$$

où l'indice i, est itéré tous les n_p pas de temps depuis le début de la simulation.

2.3.4 Termes sources

Dans le cas du criblage, les positions initiales des atomes d'oxygènes incidents sont choisies aléatoirement sur la sphère de rayon égal à l'altitude de la frontière supérieure du domaine collisionnel. Les modules et angles de leurs vitesses initiales sont déterminés à partir des distributions des flux incidents des Figures 2.7 et 2.6. Les macroparticules incidentes sont créées avec une fréquence égale à $1/(N\Delta t)$, telle que:

$$N\Delta t = \frac{W_{si}}{\Phi_i}$$

où Φ_i est le flux incident en $m^{-2} \cdot s^{-1}$ des particules de l'espèce i, W_{si} un poids par unité de surface associé à la macroparticule de type i, tel que $W_{si} \propto \frac{\sigma_i^{-1}}{N_{cell}}$, où σ_i^{-1} désigne la densité de colonne associée à l'espèce i, au dessus de l'exobase, et N_{cell} le nombre de cellules de la grille de calcul dans la zone collisionnelle.



FIG. 2.13: Distribution des vitesses de l'oxygène produit par recombinaison dissociative de O_2^+ à l'exobase de Mars. La ligne verticale correspond à la vitesse d'échappement à 200km.

Pour les réactions de recombinaison dissociative de O_2^+ et CO^+ , les densités de neutres chauds créées en un point du domaine collisionnel sont données par :

$$n_{(O,C)} = 2 \cdot \alpha \cdot [n_{(O_2^+, CO^+)}][ne] \cdot \Delta t$$
(2.10)

où α est le taux de réaction associé à chaque processus, et où l'on suppose que les densités électroniques et celle de l'ion majoritaire sont égales, soit $n_e = nO_2^+$. Dans la relation (2.10) $n_{(O,C)}$ désigne la densité totale des produits, et correspond donc, selon le cas, soit à $n_O + n_C$, soit à $2 \times n_O$. La simulation de la recombinaison dissociative de O_2^+ se décompose alors en deux cas de figure :

(1) La variation des rapports de branchement de la réaction avec l'altitude est prise en compte à partir des profils de températures électronique et ionique. Dans ce cas, l'énergie relative des réactifs est déterminée à partir des distributions Maxwelliennes des vitesses aux températures $T_i(j)$ et $T_e(j)$, où j désigne l'indice de la cellule. Les rapports de branchement sont ensuite calculés par interpolation des données de Peverall et al. (2001) pour la recombinaison dissociative de O_2^+ ou de celles de Rosen et al. (1998) pour la recombinaison dissociative de CO^+ comme énoncé au paragraphe (2.2.2). Les distributions de vitesse des atomes produits sont approximées par des gaussiennes ($\sigma^2 = 0.05$) centrées sur l'énergie de chaque canal.

(2) On se place dans l'approximation des vitesses relatives nulles des réactifs. Les vitesses des produits sont alors déterminées à partir de la distribution pour l'oxygène ¹⁶O, calculée par Fox and Hać (1997) dans le cas de la recombinaison dissociative de O_2^+ , tenant compte de l'excitation vibrationnelle de l'ion. Lors de ce calcul nous faisons l'hypothèse que cette distribution est indépendante de l'altitude (cf. Figure 2.13). Bien entendu les températures électronique et ionique, ainsi que la distribution vibrationnelle d' O_2^+ évoluent avec l'altitude. Cette approximation est donc une première étape vers un traitement plus correct de cette distribution, qui pourra intégrer l'approche de Kabin and Shizgal (2002). Cette dernière est basé sur une expression analytique du taux de variation de la fonction de distribution de l'espèce produite par recombinaison dissociative, en fonction des températures électronique et ionique, de l'exothermicité de la réaction, et de la dépendance en vitesse relative de la section efficace de collision entre les ions et les électrons. L'intégration de cette expression en fonction des rapports de branchement associé à chaque canal permet donc de tenir compte à la fois des variations avec l'altitude des températures et de la distribution vibrationnelle de l'ion. En revanche les variations avec l'altitude de la distribution vibrationnelle de O_2^+ dans l'atmosphère de Mars ne sont pas connues, et demandent donc à être modélisées par ailleurs.

Concernant la recombinaison dissociative de CO^+ , seul le cas (1) est considéré dans notre simulation. On suppose enfin que les vitesses des atomes issus de la recombinaison dissociative ne possèdent pas de dépendance angulaire (répartition isotrope), et que leurs vecteurs vitesses ont des sens opposés pour chaque paire produite.

2.3.5 Modèle numérique

Le schéma numérique que nous employons est basé sur la définition de poids, représentant pour une particule d'une espèce donnée le nombre correspondant de particules réelles dans le gaz simulé. Les limitations en puissance de calcul imposent en effet de ne suivre qu'un nombre restreint de macroparticules représentant la population de neutres chauds.

Dans le cas du criblage, les poids W(i, j) associés à la macroparticule appartenant à l'espèce *i* dans la cellule *j* sont identiques quels que soient *i* et *j*. Dans le cas de la recombinaison dissociative l'emploi de cette stratégie n'est pas possible.

La Figure (2.14) montre en effet le taux de production des oxygènes chauds en fonction de l'altitude calculés au maximum et au minimum d'activité solaire, à partir des modèles ionosphériques de Kim et al. (1998) et de Krasnopolsky (2002). Le rapport des taux de production entre le pic de création (vers 130 km) et 350km est de l'ordre de $\approx 10^4$. Utiliser des poids identiques entraînerait alors un problème de représentativité statistique des macroparticules créées à ces différentes altitudes, et un temps de calcul non réaliste.



FIG. 2.14: Comparaison des taux de production des oxygènes chauds par recombinaison dissociative de O_2^+ , au minimum (courbes tiretées et en points-tirets) et au maximum (courbes continue et en pointillés) d'activité solaire, calculés à partir des modèles ionosphériques de Kim et al. (1998) (courbes continue et tiretée), ou de Krasnopolsky (2002) (courbes en pointillés et en points-tirets).

Par conséquent nous avons défini une fonction de répartition des poids assurant une convergence du code en un temps raisonnable. Cette fonction est la suivante :

$$W(j) = \frac{(W_{max} - W_{min})\alpha(j)}{\alpha_{max} - \alpha_{min}} + \frac{(W_{min}\alpha_{max} - W_{max}\alpha_{min})}{\alpha_{max} - \alpha_{min}}$$
(2.11)

où $\alpha(j)$ est le taux de réaction dans la cellule j, W_{max} le poids maximal associé à la cellule où se trouve le pic de production (130km), et $W_{min} = 10^{-3} \times W_{max}$. Le vecteur de poids obtenu est tel que l'ensemble des macroparticules créées par pas de temps au-dessus de l'exobase représente environ 10% du nombre total de macroparticules, et que le nombre de macroparticules créées par cellule à chaque pas de temps est de l'ordre de 50. Les taux de production obtenus par cette méthode sont comparables aux taux obtenus par (Kim et al., 1998) et (Hodges, 2000) dans le cas de la recombinaison dissociative de O_2^+ . Dans chaque cellule le nombre de particules-test créées par pas de temps est donné par :

$$N(j) = E\left[\frac{n_{O,C}(j) \cdot Vcell(j)}{W(j)}\right]$$
(2.12)



FIG. 2.15: Organisation de l'algorithme de calcul. NTC-DSMC est l'abréviation de No-Time Counter Direct Simulation Monte Carlo désignant la méthode numérique. Elimit est pris comme une fraction de l'énergie d'échappement à l'exobase, de l'ordre de 0.04eV pour l'oxygène au minimum d'activité solaire, au-dessus de laquelle une particule est considérée comme énergétique.

Les étapes suivies à chaque pas de temps par l'algorithme de calcul schématisé sur la Figure 2.15 sont : (1) production de neutres énergétiques par recombinaison dissociative, ou création d'un atome d'oxygène incident à la frontière supérieure du domaine collisionnel; (2) calcul des trajectoires des particules énergétiques sous l'action du champ de gravité; (3) calcul des collisions binaires entre les particules énergétiques et celles de l'atmosphère; (4) suppression des particules dont l'énergie devient inférieure au seuil. Le nombre de particules effectivement suivies dans la simulation est fixé par un seuil en deçà duquel une particule n'est plus considérée comme énergétique. Ce seuil est de 0.04eV pour l'oxygène, ce qui signifie qu'en dessous de 275km au minimum solaire (altitude maximale atteinte par des particules ayant une énergie de 0.04eV), et de 375km au maximum solaire (pour un seuil de 0.08eV), la densité coronale que nous calculons est sous-estimée. Le pas de temps est déterminé de façon à ce que la particule la plus rapide ne parcourt qu'une fraction de la plus petite cellule.

La méthode utilisée pour calculer le taux de collision dans chaque cellule est inspirée d'une approche du type Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) développée par (Bird, 1994), qui permet de résoudre l'équation de Boltzmann explicitée précédemment, dans le cas d'un gaz dilué en régime moléculaire. Dans chaque cellule, on considère des collisions binaires entre des particules suprathermiques se déplaçant avec une vitesse relative v_r par rapport aux particules thermiques. Dans le cas d'un gaz homogène de densité n, la fréquence moyenne de collision ν des particules est :

$$\nu = n < \sigma_T v_r > \tag{2.13}$$

où $\langle \sigma_T v_r \rangle$ représente la valeur moyenne du produit de la section efficace totale de collision σ_T par la vitesse relative des particules. Le nombre moyen Nc de collisions binaires par unité de volume pendant un intervalle de temps Δt est alors :

$$Nc\Delta t = \frac{1}{2}n\nu \ \Delta t = \ \frac{1}{2}n^2 < \sigma_T v_r > \Delta t \tag{2.14}$$

où chaque paire de particules n'est comptée qu'une seule fois (facteur 1/2). Dans la mesure où le produit $\sigma_T v_r$ peut être calculé pour chaque paire, et sa valeur maximale stockée pour chaque cellule, une méthode directe de tirage au sort des paires dont les collisions sont effectives dans la simulation consisterait à utiliser directement le rapport $\frac{(\sigma_T v_r)}{(\sigma_T v_r)_{max}}$. Toutefois cette approche n'est pas réaliste car dans ce cas le temps de calcul est proportionnel au carré du nombre de molécules dans la cellule, qui devient très vite prohibitif (Bird, 1994). Pour contourner ce problème, la méthode développée par (Bird, 1994) consiste à ne sélectionner qu'un nombre représentatif de paires conduisant à des collisions. La méthode (dénommée NTC (no counter time)-DSMC) suppose de considérer que la probabilité de collisions entre deux particules-test se déplaçant dans une cellule de volume Vc pendant un temps Δt à la vitesse relative v_r , est égale au rapport entre le volume balayé par la section efficace de collision à cette vitesse, sur celui de la cellule, soit $P = \frac{W_i \sigma_T v_r \Delta_t}{Vc}$, où W_i représente le poids associé aux macroparticules de type i. Si N est le nombre total de macroparticules présentes dans la cellule, le nombre de paires est N(N-1)/2, avec $N = \frac{nVc}{W_i}$. En pratique comme en général P est très petit devant 1, il ne peut pas être utilisé pour réaliser un tirage statistique efficace. Aussi l'idée consiste à diminuer le nombre de paires de collisions *possibles*, et à augmenter dans la même proportion la probabilité qu'une paire réalise une collision effective. Le nombre maximum de collisions possibles dans la cellule de volume Vc s'écrit alors:

$$\frac{1}{2}N\bar{N}\frac{W_i(\sigma_T v_r)_{max}\Delta_t}{Vc}$$

où \overline{N} représente la valeur moyenne du nombre de macroparticules présentes dans la cellule pendant Δt . La probabilité qu'une paire sélectionnée produise effectivement une collision est alors donnée par le rapport $\frac{\sigma_T v_r}{(\sigma_T v_r)_{max}}$ (obtenu en divisant P par P_{max} la probabilité de collision maximale dans la cellule, ce qui revient à augmenter la probabilité de collision).

Dans le cas du criblage nous considérons les collisions entre des macroparticules énergétiques de différentes espèces (O, CO, CO₂, C), de type A, sur les mêmes espèces thermiques de l'atmosphère, de type B. Comme on l'a dit les poids W_i associés à toute macroparticule ne prennent qu'une seule valeur W dans toute cellule, quelle que soit l'espèce. Dans ce cas l'expression du nombre maximum de collisions effectives N^c dans la cellule c est donnée par:

$$N_{max}^c = \frac{N_A \cdot N_B^c \cdot W \cdot (\sigma_v \cdot v_{AB})_{max}^c \cdot \Delta t}{V_c}$$
(2.15)

où N_A et N_B^c sont les nombres de macroparticules de type A et B. Les espèces étant différenciées pour le calcul du nombre de paires, le facteur 1/2 n'est plus nécessaire dans ce cas.

Pour la recombinaison dissociative la situation est différente puisque nous considérons un gaz non homogène, auquel on associe des macroparticules de poids variables. La procédure que nous venons de décrire a donc dû être adaptée à ce cas spécifique.

Comme nous l'avons vu le rapport des maxima de production de l'oxygène atomique entre 130 et 350km atteint pratiquement 4 ordres de grandeurs, ce qui entraînerait dans l'hypothèse des poids identiques des temps de calcul non réalistes pour représenter correctement la production d'atomes suprathermiques à haute altitude. Dans une cellule donnée nous affectons alors le même poids aux espèces appartenant au fond thermique et aux neutres chauds créés dans cette cellule. On note N_A^c le nombre de particules-test de type A dans la cellule c, qui effectue des collisions avec les particules de gaz thermique de type B, de densité n_B^c . Le nombre total de collisions A-B est alors déterminé de manière fractionnée en effectuant N_A^c boucles (et non plus une seule boucle comme dans le cas du criblage), puisque le poids affecté à une macroparticule de type A peut varier à l'intérieur d'une même cellule. Dans ce dernier cas nous estimons donc, *pour chaque particule suprathermique* A_i de la cellule c le nombre maximum de collisions par :

$$N_{max}^{c,i} = \frac{W_{A_i} \cdot E\left[\frac{n_B^c \cdot V_c}{W_{A_i}}\right] \cdot (\sigma_v \cdot v_{AB})_{max}^c \cdot \Delta_t}{V_c}$$
(2.16)

où W_{A_i} est le poids attribué à la particule-test de type A numéro i, $E\left[\frac{n_B^c \cdot V_c}{W_{A_i}}\right]$ le nombre de poids W_{A_i} représente le nombre de particules thermiques dans la cellule c, et $(\sigma_v \cdot v_{AB})_{max}^c$ est la valeur maximum du produit de la section efficace de collision σ_v et de la vitesse relative v_{AB} de A et B prise sur la cellule et sur toute la simulation. Une paire est ensuite sélectionnée parmi les $N_{max}^{c,i}$ possibles avec une probabilité égale à la probabilité de collision avec la particule chaude A_i , c'est-à-dire $\frac{W_{A_i}(\sigma_v \cdot v_{A_iB})\Delta_t}{V_c}$, divisée par la probabilité maximum de collision entre les espèces A et B dans la cellule. La probabilité qu'une collision devienne effective est donnée par : $\frac{(\sigma_v \cdot V_{A_iB})}{(\sigma_v V_{A_B})_{max}}$, où v_{A_iB} est la vitesse relative entre A_i et une particule B choisies aléatoirement à la température de l'atmosphère.

2.3.6 Calcul des phases de transport et de collisions

Le calcul des trajectoires ne présente pas de difficultés particulières puisqu'il s'agit d'une intégration de l'équation du mouvement des particules dans le champ de gravité. La méthode d'intégration est basée sur un schéma de Runge-Kutta d'ordre 2, plus rapide que le schéma d'ordre 4 et assurant une précision suffisante. Le déroulement des collisions entre une particule-test et les autres types de particules est traité par une approche de type Dynamique Moléculaire, lorsqu'une des particules au moins est une molécule. Dans cette approche les collisions mettant en jeu des molécules peuvent entraîner des dissociations. Les interactions C-O et O-O dans les molécules de CO₂ ou CO sont décrites par des potentiels d'interaction de Morse explicités dans Johnson and Liu (1998). L'équation du mouvement des atomes de la molécule dans ces potentiels est intégrée par l'emploi d'un modèle de prédiction-correction de Gear du 4ème ordre (Allen and Tildesley, 1987). Une dissociation moléculaire intervient lorsque la distance entre deux atomes devient plus grande que la distance de séparation (cutoff) du potentiel en question. Un potentiel Universel (Ziegler et al., 1985) est utilisé pour décrire les paramètres post-collisionnels (vitesses et énergies) lors d'une collision entre deux atomes (appartenant ou non à une molécule). Lors d'une collision moléculaire, la molécule peut soit se dissocier, soit s'exciter vibrationnellement. Dans ce dernier cas l'énergie interne est conservée entre deux collisions successives. De ce fait la désexcitation de la molécule par émission radiative ou collisions à large paramètre d'impact est négligée. Toutefois, la perte d'énergie par excitation électronique et par ionisation des atomes et molécules environnantes est prise en compte par un terme de perte déduit après chaque collision, suivant la formulation de Oen and Robinson (1976). Lorsque l'énergie relative des particules devient inférieure à une certaine limite, les collisions sont traitées dans l'approximation des Sphères Dures.

2.4 Principaux résultats obtenus

2.4.1 Densités exosphériques

La Figure 2.16 représente les profils de densité des espèces O, C, CO, et CO_2 , produites par le criblage de l'atmosphère (identifié par (sput)), et la recombinaison dissociative (identifiée par (dr)). Ces profils sont calculés entre 270km (graphiques (a,c) au minimum d'activité solaire) ou 375km (graphiques (b,d) au maximum d'activité solaire) et 6000km d'altitude au-dessus de la surface, à partir du modèle atmosphérique de Kim et al. (1998).

La Figure 2.16(a) montre que la production d'oxygène suprathermique par recombinaison dissociative (courbe noire en trait plein) domine de deux ordres de grandeur la production par criblage (courbe noire en tirets) au minimum d'activité solaire. Entre le minimum et le maximum d'activité solaire la recombinaison dissociative entraîne une augmentation globale d'un facteur 2 de la densité de l'oxygène chaud (courbes noires des Figures (a) et (b)), en correspondance avec l'accroissement d'intensité du flux EUV solaire incident, et la production indirecte de l'ion O_2^+ à partir de la photodissociation de CO_2 . Ce facteur entre le minimum et le maximum d'activité solaire est par ailleurs similaire aux résultats préalablement obtenus par Kim et al. (1998), bien que nos densités soient inférieures d'un facteur 2 par rapport à celles de Kim et al. (1998), ce qui est imputable en partie aux différentes méthodologies employées. Au minimum d'activité solaire on obtient pour l'oxygène un profil de densité très proche de celui calculé par Hodges (2000), dont l'approche numérique de type particulaire est similaire à la nôtre, et les paramètres atmosphériques également très voisins.

En ce qui concerne le criblage, deux ordres de grandeur séparent les densités produites, toutes es-



FIG. 2.16: Profils de densité des composantes suprathermiques de O, CO₂, CO, et C au minimum (a,c) et au maximum (b,d) d'activité solaire. (a): Oxygène chaud produit lors de la recombinaison dissociative des ions O_2^+ (ligne continue), et lors du criblage de l'atmosphère par des ions pick-up O^+ (tirets). Le trait continu rouge portant des carrés correspond au profil calculé par Kim et al. (1998), le trait continu bleu portant des triangles au profil calculé par Hodges (2000). (b): Oxygène et Carbone produits par recombinaison dissociative des ions O_2^+ et CO⁺ et lors du criblage de l'atmosphère par des ions pick-up O^+ : O créé par criblage (tirets), C créé par criblage (cercles), O créé par recombinaison dissociative (trait plein), C produit par recombinaison dissociative (triangles). (c et d): Profils de densité de CO₂ et CO. Les carrés et tirets correspondent respectivement à CO₂, CO, créés lors du criblage, alors que le trait plein et les triangles correspondent respectivement à CO et CO₂ créés lors du collisions avec l'oxygène chaud produit par la recombinaison dissociative des ions O_2^+ .

pèces confondues, entre le minimum et le maximum d'activité solaire, ce qui peut être relié à l'accroissement du flux d'ions pick-up incidents (de $5.9 \times 10^{23} s^{-1}$ au minimum à $3.6 \times 10^{25} s^{-1}$ au maximum). Au maximum d'activité solaire des densités supérieures à $10^2 cm^{-3}$ sont obtenues pour les espèces lourdes telles que CO et CO₂ en dessous de 1000km.

Une constatation intéressante peut être faite sur les Figures 2.16 (c) et (d), qui montrent que les deux processus non thermiques engendrent des échelles de hauteur nettement différentes pour le CO_2 . Une telle caractéristique est potentiellement exploitable sur le plan observationnel pour différencier les processus en question. Les densités barométriques de l'oxygène et du CO_2 sont également tracées sur la Figure 2.16, pour lesquelles on a pris des températures de 200K au minimum d'activité solaire et de 300K au maximum (cohérentes avec le modèle de Kim et al. (1998)). En comparaison l'échelle de hauteur des populations suprathermiques augmente rapidement avec l'altitude en raison de la contribution croissante de particules qui s'échappent.

On observe par ailleurs que les collisions entre le gaz atmosphérique et l'oxygène chaud provenant de la recombinaison dissociative de O_2^+ ou bien avec les ions pick-up incidents engendrent au maximum d'activité solaire des densités de CO et CO₂ du même ordre en dessous de 1000km. Dans le cas de la recombinaison dissociative ces densités varient peu en fonction de l'activité (de moins d'un facteur 2), ce qui implique la présence significative d'espèces lourdes dans la partie basse de l'exosphère (< 1000km) quelle que soit l'activité solaire. Cette constatation s'explique par le fait que l'altitude du pic ionosphérique est sensiblement la même entre le minimum et le maximum d'activité solaire (Kim et al., 1998), alors que l'atmosphère neutre est sensiblement plus étendue en altitude en conditions d'activité solaire maximale que minimale. De ce fait, les particules énergétiques dont les vecteurs vitesses sont dirigés vers le haut traversent une densité de colonne au-dessus du pic ionosphérique plus grande au maximum d'activité solaire qu'au minimum. Par conséquent, les molécules de CO et de CO₂ issues des collisions avec l'oxygène chaud au maximum d'activité solaire effectuent un nombre de collisions plus important qu'au minimum d'activité solaire avant d'atteindre l'exobase.

La détection récente du côté jour d'ions appartenant au vent solaire par l'analyseur ASPERA-3 (Lundin and Barabash, 2004) jusqu'au périapse de la sonde Mars Express situé à 270km indique que le vent solaire pénètre directement dans l'ionosphère de Mars. De ce fait des réactions d'échange de charges, des collisions entre les espèces neutres et ces ions, et dans une moindre mesure la photoionisation, sont susceptibles de provoquer l'ionisation d'une partie du flux montant des espèces lourdes dont nous avons calculé les densités (ce qui est bien sûr également vrai pour les espèces atomiques). Les ions ainsi formés peuvent alors être accrétés par le vent solaire, et participer à l'échappement d'ions d'origine planétaire. Un autre effet intéressant est suggéré par les observations de Titan par CASSINI. En effet, INMS/CASSINI a observé une couronne chaude significative dès l'exobase. Un des mécanismes suggéré pour expliquer ce chauffage apparent au niveau de l'exobase est l'interaction du plasma magnétosphérique de Saturne par échanges de charges et d'énergie avec la haute atmosphère neutre de Titan (De La Haye et al., 2006), puisque, à l'instar de Mars, ce plasma semble pénétrer profondément l'atmosphère de Titan. On peut également mentionner les dernières observations issues des données de l'analyseur d'ions (IMA) à bord de Mars Express (Fedorov et al., ress; Carlsson et al., 2006), qui font état de la détection d'ions planétaires dans la queue magnétosphérique martienne. Notre approche étant purement gravitationnelle nous ne sommes toutefois pas en mesure de quantifier le flux d'ions produit par ces processus à partir de nos sorties.

Au maximum d'activité solaire on observe sur la Figure 2.16(b) que le rapport entre les profils de densité de l'oxygène suprathermique issu du criblage (trait noir pointillé) et de la recombinaison dissociative (trait noir plein) est supérieur à $\frac{1}{2}$ pour des altitudes inférieures à 1000km. Ce chiffre illustre l'importance relative de l'intensité du criblage en tant que source non thermique d'oxygène chaud exosphérique par rapport aux sources photochimiques dans des conditions de forte activité solaire, et rejoint en cela les conclusions de Johnson and Luhmann (1998) et Leblanc and Johnson (2002).



FIG. 2.17: Taux de dissociation des espèces moléculaires CO et CO_2 , lors du criblage, en fonction des espèces incidentes, au maximum d'activité solaire.



FIG. 2.18: Distribution d'énergie de l'oxygène et du carbone atomiques issus des dissociations de CO_2 et de CO au maximum d'activité solaire.

La Figure 2.17 montre les profils du taux volumique de dissociation des molécules CO_2 et CO en



FIG. 2.19: Perte d'énergie cumulée (en pourcentage de l'énergie incidente) en fonction de l'altitude (en m), par particule incidente, lors des collisions entre O et CO_2 , au maximum d'activité solaire (courbe jaune), au minimum d'activité solaire (courbe marron); lors des collisions entre O et O ou C, au maximum d'activité solaire (courbe bleu), au minimum d'activité solaire (courbe cyan); lors des collisions entre O et CO, au maximum d'activité solaire (courbe rose), au minimum d'activité solaire (courbe mauve).

fonction de l'altitude et du type d'impactant (O, C, CO₂ ou CO), lors du criblage de l'atmosphère, au maximum d'activité solaire. Pour les deux branches conduisant majoritairement à la dissociation de CO₂ (courbe mauve: $CO_2 + O^* \rightarrow CO + O$) et (courbe jaune: $CO_2 + O^* \rightarrow C + O + O$), et celle conduisant à la dissociation de CO, les taux de production intégrés d'atomes d'oxygène entre 100 et 400 km sont de $1.3 \times 10^7 cm^{-2} . s^{-1}$, et de $1.9 \times 10^5 cm^{-2} . s^{-1}$ respectivement, avec un pic de production voisin de 150km.

Les distributions d'énergies de l'oxygène et du carbone atomiques issus de ces dissociations sont présentées sur la Figure 2.18. L'oxygène produit possède une énergie moyenne de 44eV. Dans le cas du carbone issu de la seconde branche de dissociation du CO₂, l'énergie moyenne est de 23eV.

Ces énergies sont importantes, et peuvent contribuer de manière non négligeable au chauffage de la thermosphère. On peut tenter de comprendre l'origine de ces valeurs en considérant les paramètres régissant le partitionnement de l'énergie lors des dissociations dans notre simulation. Rappelons que l'énergie moyenne des ions pick-up incidents au niveau de l'exobase est de 1keV.

La Figure 2.19 représente la perte d'énergie cumulée (en pourcentage de l'énergie incidente) de l'oxygène incident, à partir du sommet de la zone collisionnelle (400km), en fonction de l'espèce cible, et de l'activité solaire (le graphique est restreint aux valeurs supérieures à 1 pour mille). Les valeurs que nous avons obtenues ici sont en bon accord avec les sorties du code 1D planaire publiées dans Leblanc and Johnson (2002). Quelle que soit l'activité solaire, on observe que la très grande majorité de l'énergie incidente (de l'ordre de 80% de l'énergie totale) est perdue entre 120km et 220 km. Le pourcentage d'énergie perdue cumulée jusqu'au pic de dissociation à 150km est d'environ 55% de l'énergie incidente d'après la Figure 2.19. Les atomes incidents arrivant à cette altitude disposent donc

en moyenne d'une énergie de 450eV.

On peut tenter de comprendre comment cette énergie est répartie entre les constituants de la molécule cible de CO_2 en nous basant sur les caractéristiques du modèle de dynamique moléculaire que nous utilisons. Le modèle de dynamique moléculaire employé dans notre simulation est décrit dans Johnson and Liu (1998). Il permet en particulier de calculer les sections efficaces de dissociations de CO_2 résultant notamment de collisions avec l'oxygène atomique énergétique, ainsi que les sections efficaces de transfert d'énergie entre l'oxygène incident et la molécule de CO_2 .

FIG. 2.20: (a) Fraction d'énergie transférée à la molécule de CO_2 en fonction de πb^2 où b est le paramètre d'impact. T est l'énergie transférée à la molécule tandis que E est l'énergie de l'atome d'oxygène incident. Les courbes correspondent à trois valeurs de E: 60eV (pointillés), 200eV (tirets), et 600eV (ligne continue). (b) Fraction d'énergie E_{CO_2} transférée au centre de masse de la molécule de CO_2 , par rapport à l'énergie totale transférée T. (Johnson and Liu, 1998)



La Figure 2.20(a) montre la proportion de l'énergie incidente transférée à la molécule de CO₂ par l'atome d'oxygène incident en fonction du paramètre d'impact. La valeur maximale en abscisse (16 × $10^{-16}cm^2$) correspond à un paramètre d'impact égal à 2.25. Pour des énergies incidentes inférieures à 600eV (trait plein), la figure montre que la fraction d'énergie transférée à la molécule est très proche de 0 pour des valeurs supérieures à 2. Dans notre modèle la valeur du paramètre d'impact des collisions entre O et CO₂ est choisie aléatoirement entre 0 et 4. La Figure 3 de Johnson and Liu (1998) (non reproduite ici) nous permet par ailleurs de constater que la dissociation de CO₂ menant à la libération du carbone atomique (dans notre modèle suivant le canal: $CO_2 + O \rightarrow C + O + O$) se produit pour des paramètres d'impacts inférieurs à 1. La libération d'un atome d'oxygène, résultant du même canal ou bien de $CO_2 + O \rightarrow CO + O$, se produit pour des paramètres d'impacts inférieurs à 2.

Dans le cas du carbone, à partir de la plage [0-1] et de l'énergie moyenne des oxygènes incidents estimée dans la région du pic de dissociation (450eV), on obtient à partir de la Figure 2.20(a) une fraction d'énergie moyenne transférée à la molécule variant entre 60%, soit 270eV (à 0) et 15% (à 1), soit 67.5eV.

Une façon d'estimer la plage d'énergie possible pour l'énergie moyenne du carbone atomique est de faire appel à la Figure 2.20(b) qui indique la fraction d'énergie transférée au centre de masse de la molécule de CO_2 en fonction du paramètre d'impact. Pour l'énergie moyenne des atomes incidents de 450eV, cette fraction est de l'ordre de 40% de l'énergie totale transférée (le reste sert donc à l'excitation électronique de la molécule). L'énergie moyenne transférée à la molécule sous forme d'énergie translationnelle varie donc entre 108eV (à 0) et 27eV (à 1). En cas de dissociation de la molécule de CO_2 et de libération d'un atome de carbone, l'énergie translationnelle reçue par ce dernier est de l'ordre du rapport des masses impliquées, soit 28% de l'énergie totale transférée au centre de masse de la molécule, ce qui donne une énergie pouvant varier de 6eV à 31eV.

Le reste de l'énergie transférée revient aux deux atomes d'oxygènes résultants de la dissociation de CO₂. En faisant l'hypothèse d'une équipartition de l'énergie transférée entre ces deux atomes, on obtient pour l'oxygène une plage d'énergie allant de 32eV à 95eV. Là encore l'énergie moyenne trouvée pour l'oxygène se situe dans la fourchette de valeurs déterminées.

On voit donc que les énergies moyennes des populations atomiques issues des dissociations moléculaires sont cohérentes avec les caractéristiques du modèle employé. En revanche Johnson and Liu (1998) montrent que la fraction de l'énergie incidente utilisée pour dissocier les molécules est faible par rapport à la fraction utilisée pour leur excitation vibrationnelle sans dissociation. Il semble donc que la composante énergétique ainsi créée ne dissipe en réalité qu'une faible partie de l'énergie incidente, utilisée par ailleurs pour l'excitation des molécules et le chauffage de la thermosphère.

Sur la Figure 2.21 on peut apprécier l'effet de l'inclusion des dissociations dans le modèle sur les densités de l'oxygène dans l'exosphère. En particulier on s'aperçoit que la densité d'oxygène exosphérique est augmentée d'un facteur 2 environ lorsque ces dissociations sont considérées (alors que le rendement du criblage ne l'est pas (Leblanc and Johnson, 2002)). En l'absence de dissociations le déficit d'oxygène provient simplement de l'oxygène demeurant dans les molécules de CO ou de CO_2 . Il apparaît donc que la population d'oxygène atomique provenant de dissociations représente environ 50% de la densité exosphérique issue du criblage.

La Figure 2.22 montre dans le cas de la recombinaison dissociative les écarts obtenus entre les profils de densités de l'oxygène chaud calculés à partir de chacun des deux modèles atmosphériques employés, d'une part celui de Kim et al. (1998), et d'autre part celui de Krasnopolsky (2002). Les densités calculées dans le cas de Kim et al. (1998) (courbes avec des cercles) dominent celles de Krasnopolsky (2002) (courbes avec des carrés) d'un facteur 5 au minimum d'activité solaire, et d'un facteur 2 au maximum. Ces différences sont reliées en grande partie aux différences entre les modèles ionosphériques dans ces deux travaux (correspondant respectivement à un angle zénithal solaire (AZS) de 45° dans le cas de Kim et al. (1998) et de 60° Krasnopolsky (2002)), comme l'atteste la courbe en trait plein correspondant au profil calculé au minimum d'activité solaire à partir de la thermosphère de Krasnopolsky (2002) associée à l'ionosphère de Kim et al. (1998). Celle-ci est en effet très proche du profil calculé à partir du modèle de Kim et al. (1998) au minimum d'activité solaire (ligne continue avec des cercles). Les taux de production de l'oxygène chaud par recombinaison dissociative présentés sur la Figure 2.14 de la section 2.3.5 permettent également de situer le facteur entre les productions obtenues dans l'ionosphère de Kim et al. (1998) et dans celle de Krasnopolsky (2002) dans un intervalle



FIG. 2.21: Au maximum d'activité solaire : effet de l'inclusion des dissociations moléculaires sur les densités d'oxygène atomique (pointillés) obtenues lors du criblage. La frontière en pointillés à 1000km indique l'altitude en dessous de laquelle la densité coronale est sous-estimée (en raison du seuil en énergie limitant la population de neutres énergétiques). On observe une augmentation d'un facteur 2 de la densité d'oxygène exophérique lorsque les dissociations sont considérées.

de 1 à 5 entre 130km et 200km, au minimum d'activité solaire, et de 1 à 1.6 entre 130km et 230km au maximum d'activité solaire. Au minimum d'activité solaire les différences notables entre les modèles ionosphériques expliquent donc les écarts entre les densités exosphériques obtenues. Au maximum d'activité solaire les ionosphères sont très proches (cf. Figure 2.11) et le faible écart observé entre les taux de production n'explique pas à lui seul le facteur 2 entre les densités. En revanche on peut voir Figure 2.11 que la thermosphère de Krasnopolsky (2002) est sensiblement plus dense que celle de Kim et al. (1998), ce qui joue en faveur d'une densité d'oxygène exosphérique plus importante dans le cas de Kim et al. (1998).

Les profils calculés illustrent donc les variabilités importantes des densités exosphériques de l'oxygène issu de la recombinaison dissociative en fonction de l'inclinaison solaire. En effet la densité électronique varie sensiblement en fonction de l'angle zénithal d'après les données de radio-occulation transmises par les sondes Viking (Zhang et al., 1990) entre le jour et la nuit martiennes. D'autre part, les travaux de Krymskii et al. (2003) établissent une corrélation entre des variations longitudinales du pic de densité électronique et la présence de mini-magnétosphères localisées dans l'hémisphère nord de Mars à partir des données de radio-occultation de Mars Global Surveyor. Ces auteurs ont mis en évidence une oscillation de la densité du pic (d'une amplitude maximale relative de 15%) à une longitude voisine de 60° corrélée spatialement à une anomalie du champ magnétique crustal situé entre



FIG. 2.22: Influence des modèles thermosphériques et ionosphériques de Kim et al. (1998) et Krasnopolsky (2002) sur la densité d'oxygène chaud créée par recombinaison dissociative. Ligne continue+carrés pleins : densité obtenue à partir du modèle de Krasnopolsky au minimum d'activité solaire. Ligne tiretée+carrés évidés: densité obtenue à partir du modèle de Krasnopolsky au maximum d'activité solaire. Ligne continue+cercles pleins : densité obtenue à partir du modèle de Kim au minimum d'activité solaire. Ligne en pointillé+cercles évidés : densité obtenue à partir du modèle de Kim au maximum d'activité solaire. Ligne continue : densité obtenue à partir du modèle thermosphèrique de Krasnopolsky associé au modèle d'ionosphère de Kim au minimum d'activité solaire.

67° et 80° de latitude Nord. Cette hausse locale de la densité des électrons s'accompagne d'une hausse de leur température, en raison de leur piégeage par les ligne de champ magnétique de la magnétosphère localisée. Bougher et al. (2004) ont par ailleurs mis en évidence des variations de l'altitude du pic ionosphérique (d'environ 6km d'amplitude) avec la longitude dans une bande de latitude très voisine (65-78N), durant le passage de Mars à son aphélie durant deux années martiennes consécutives. D'après les auteurs les variations observées sont reliées à des ondes des marées verticales engendrées par la topographie martienne.

Les écarts obtenus entre les modèles de Kim et al. (1998) et Krasnopolsky (2002) montrent au minimum d'activité solaire que des variations de l'ordre de 25% de la densité du pic ionosphérique se traduisent par des variations fortes de la densité d'oxygène exosphérique issue de la recombinaison dissociative. De ce fait des variations de l'ordre de celle mise en évidence dans Krymskii et al. (2003) doivent avoir des implications directes sur le contenu de l'exosphère. Toutefois si une augmentation de la densité de l'ionosphère entraîne une hausse de taux de production de la recombinaison dissociative de O_2^+ , une augmentation de la température électronique joue dans le sens contraire, et un calcul précis de ces variations relatives est nécessaire pour estimer si un effet conséquent sur la densité de l'exosphère peut être prédit.

L'altitude du pic ionosphérique joue également un rôle important comme on l'a vu dans le cas de CO_2 et de CO puisque sa position dans la thermosphère influe sur les densités des espèces lourdes

dans l'exosphère. Les oscillations mises en évidence par Bougher et al. (2004) doivent aussi avoir une signature dans l'exosphère.

La compréhension des effets de ces paramètres sur la production de la couronne neutre énergétique nécessite donc d'avantage d'efforts de modélisation. Il est toutefois intéressant de souligner que le champ crustal, qui influe sur le contenu de l'ionosphère, possède potentiellement une signature dans la distribution des densités exosphériques issues de la recombinaison dissociative. De la même façon l'influence sur l'ionosphère des variations temporelles du flux EUV solaire doivent se transmettre au niveau de l'exosphère. Tous ces éléments indiquent en particulier qu'une mesure des densités de l'exosphère doit être couplée à une mesure simultanée de l'état de l'ionosphère.

Si l'on se cantonne à la dépendance principale du contenu ionosphérique, qui est l'angle zénithal solaire (proche de $\cos(AZS)$), on peut attendre un maximum d'efficacité pour le processus de recombinaison dissociative au voisinage du point subsolaire, ce qui va se traduire par une variation de densité de l'exosphère entre le point subsolaire et le terminateur. La situation est différente dans le cas du criblage. En effet des calculs récents issus d'une modélisation hybride 3D (cinétique pour les ions, et fluide pour les électrons) de l'interaction du vent solaire avec Mars (Modolo et al., 2004; Chaufray et al., 2006), décrivent le flux incident d'oxygène atomique comme fortement asymétrique et impactant préférentiellement dans la région du terminateur, en fonction de l'orientation et de l'intensité de l'IMF.

2.4.2 Echappement

Le tableau 2.1 présente les taux d'échappement hémisphériques que nous avons calculés pour la recombinaison dissociative et le criblage. Les résultats d'études précédentes y sont également reportés à titre comparatif.

La recombinaison dissociative de O_2^+ au minimum d'activité solaire entraîne dans notre modèle un taux d'échappement de $2.1 \times 10^{25} s^{-1}$, comparable à un facteur 2 près à celui calculé par Kim et al. (1998) $(3.4 \times 10^{25} s^{-1})$ et à celui calculé par Hodges (2002) $(4.4 \times 10^{25} s^{-1})$. Hodges (2000) obtient un taux d'échappement du côté jour égal à $2.8 \times 10^{25} s^{-1}$, qui est très proche du taux que nous obtenons. Au maximum d'activité solaire le taux d'échappement que nous obtenons est dominé d'un facteur 3.6 par celui de Hodges (2002) $(1.8 \times 10^{26} s^{-1})$. Ces différences sont toutefois difficiles à expliquer en raison du peu de détails disponibles sur le modèle employé par Hodges (2002).

Le taux d'échappement hémisphérique calculé par Krestyanikova and Shematovich (2005) au minimum d'activité solaire $(6.5 \times 10^{24} \text{s}^{-1})$ est de 4 à 5 fois plus faible que celui que nous obtenons en utilisant l'atmosphère de Kim et al. (1998). Il est légèrement plus élevé , mais du même ordre, que le taux que nous avons calculé en utilisant l'atmosphère de Krasnopolsky (2002) ($5.5 \times 10^{24} \text{s}^{-1}$). Au maximum d'activité solaire le taux d'échappement que nous obtenons à partir de l'atmosphère de Kim et al. (1998) est dominé d'un facteur 2 par celui calculé par Krestyanikova and Shematovich (2005). Cet écart est doublé lorsque nous considérons l'atmosphère de Krasnopolsky (2002). Par conséquent notre taux d'échappement est significativement plus faible que celui calculé par Krestyanikova and Shematovich (2005) au maximum d'activité solaire.

Modèle	Minimum solaire (s^{-1})	Maximum solaire (s^{-1})
Recombinaison dissociative de O_2^+ (ce travail)		
O (Kim)	2.1×10^{25}	5×10^{25}
$CO (Kim)^{(5)}$	5×10^{22}	$5.8 imes 10^{22}$
O (Krasnopolsky)	$5.5 imes10^{24}$	$2.6 imes 10^{25}$
O Hodges $(2002)^{(1)}$	4.4×10^{25}	$1.8 imes 10^{26}$
O Kim et al. (1998) (valeurs corrigées) ⁽²⁾	$3.4 imes 10^{25}$	$8.5 imes 10^{25}$
O Krestyanikova and Shematovich $(2005)^{(3)}$	$6.5 imes10^{24}$	1.1×10^{26}
Recombinaison dissociative de CO^+ (ce travail)		
C (Kim)	4.6×10^{20}	4.1×10^{22}
Criblage (ce travail)		
0	4.9×10^{23}	3.7×10^{25}
CO_2	$2.3 imes 10^{22}$	1.8×10^{24}
CO	3.5×10^{22}	2.2×10^{24}
С	$8.3 imes 10^{22}$	5.0×10^{24}
Criblage (Leblanc and Johnson, 2002) ⁽⁴⁾		
0	3.4×10^{23}	4.1×10^{25}
CO_2	4.8×10^{22}	2.8×10^{24}
CO	$3.6 imes 10^{22}$	2.4×10^{24}
С	8.8×10^{22}	7.5×10^{24}

TAB. 2.1: Taux d'échappement atmosphérique issus de la recombinaison dissociative et du criblage. ⁽¹⁾ Le modèle de Hodges (2002) tient compte de la relaxation collisionnelle de $O(^{1}D)$ et $O(^{1}S)$. Il se place dans le cas d'une ionosphère diurne (cas Mars-L du modèle de (Hodges, 2000)), en se basant sur les modèles thermosphérique et ionosphérique de Kim et al. (1998) au minimum et au maximum d'activité solaire. ⁽²⁾ Les valeurs données dans (Kim et al., 1998) doivent être multipliées par un facteur 6.5 (d'après Nagy et al. (2001)), pour aboutir au taux d'échappement hémisphérique du côté jour. ⁽³⁾ Les sections efficaces de collisions élastique et inélastique sont prises en compte pour les collisions O-O et O- CO_{2} , dans le modèle (B) de Krestyanikova and Shematovich (2005). Les valeurs calculées par ces auteurs sont intégrées ici sur un hémisphère. ⁽⁴⁾ Les valeurs au maximum d'activité solaire correspondent à la moyenne des taux d'échappement obtenus aux périodes 1EUV et 3EUV par Leblanc and Johnson (2002). ⁽⁵⁾ L'échappement de CO résulte des collisions avec l'oxygène chaud provenant de la recombinaison dissociative des ions O_{2}^{+} . L'échappement de CO_{2} n'est pas observé dans ce cas.

Le modèle noté B de Krestyanikova and Shematovich (2005) est basé sur l'atmosphère de Krasnopolsky (2002) et utilise en particulier les sections efficaces de collisions élastiques (différentielles) et inélastiques pour les collisions O-O et O-CO₂. La section efficace différentielle de collision élastique employée par ces auteurs possède une forte dépendance aux petits angles de diffusion pour les énergies de collisions typiques des produits de la recombinaison dissociative (< 5eV), entraînant une probabilité de collisions plus élevée. Dans notre modèle, le traitement des collisions dans cette gamme d'énergie est simplifié par l'emploi d'un potentiel de type Sphère Dure, ou d'un potentiel de type Potentiel Universelle. Par conséquent à la différence de Krestyanikova and Shematovich (2005) la distribution des angles de diffusion est quasi isotrope dans notre cas.

Ces caractéristiques expliquent que Krestyanikova and Shematovich (2005) trouvent un taux de thermalisation des oxygènes chauds plus faible que le nôtre lors des collisions avec les particules de la thermosphère, et donc un taux d'échappement plus élevé. Cet effet est beaucoup plus prononcé au
maximum d'activité solaire qu'il ne l'est au minimum, en partie en raison de la densité de colonne légèrement plus grande au-dessus du pic ionosphérique au maximum d'activité solaire (de l'ordre de $1.4 \times 10^{16} \text{cm}^{-2}$) qu'au minimum d'activité (où elle est de l'ordre de 10^{16}cm^{-2}). Cela nous permet de souligner que la position du pic ionosphérique par rapport à l'exobase dans la thermosphère influence le taux d'échappement, de même qu'il influence le contenu de l'exosphère.

Il est enfin notable qu'au maximum d'activité solaire nous obtenons un taux d'échappement pour l'oxygène suprathermique issu du criblage $(3.7 \times 10^{25} s^{-1})$ qui représente environ 75% du taux issu de la recombinaison dissociative.

Nous observons par ailleurs un taux d'échappement de CO d'environ $5.10^{22} s^{-1}$, issu des collisions avec les oxygènes chauds créés par la recombinaison dissociative de O_2^+ . Ce taux est quasiment indépendant de l'activité solaire, et représente environ 40% du taux d'échappement du carbone résultant du criblage au minimum d'activité solaire (en cumulant la perte des trois espèces carbonées). La perte de matière engendrée par ce flux sur 3.5 milliards d'années peut être estimée à 5.5×10^{39} molécules, ce qui est négligeable en comparaison de la perte de 6.5×10^{41} molécules provoquée par le criblage d'après l'estimation de Leblanc and Johnson (2002). Si l'on tient compte de la photodissociation de CO qui apparaît comme la principale source d'échappement du carbone identifiée par Nagy et al. (2001) et Fox and Bakalian (2001), on s'aperçoit que l'échappement du carbone est dominé d'un facteur 6 environ par la photochimie au minimum solaire (avec un flux de l'ordre de $4.3 \times 10^{23} s^{-1}$ d'après Fox (2004)). En revanche le taux d'échappement de $5.10^{22} s^{-1}$ de CO domine de deux ordres de grandeurs le taux d'échappement du carbone issu de la recombinaison dissociative de CO⁺, que nous obtenons ($4.6 \times 10^{20} s^{-1}$).

Au maximum d'activité solaire, le criblage induit dans notre simulation un taux d'échappement du carbone atomique de $5 \times 10^{24} \ s^{-1}$, alors très similaire à celui obtenu à partir des principales sources photochimiques, calculé par Fox (2004), de l'ordre de $6.4 \times 10^{24} \ s^{-1}$. D'après nos estimations le taux d'échappement cumulé du carbone produit lors du criblage est de l'ordre de $9 \times 10^{24} \ s^{-1}$ au maximum d'activité solaire, faisant de ce processus une des sources principales d'échappement du carbone atmosphérique. Précisons au passage qu'au minimum d'activité solaire, les flux d'échappement cumulés de CO et CO₂ représentent environ 56% du taux d'échappement du carbone sous toutes ses formes, au maximum d'activité ce pourcentage n'est que de 44% en raison de l'effet important du criblage. En tenant compte des flux issus de la photodissociation de CO ces fractions sont ramenées respectivement à 10% et 35%.

La densité coronale du carbone atomique issu du criblage présentée sur les Figures 2.16(c) et (d) est faible en comparaison des densités du CO et du CO₂, alors que son taux d'échappement est comparativement plus important (il domine d'un facteur 2.8 par rapport à celui du CO₂ au maximum d'activité solaire). Le rapport de ces densités à l'exobase (sous-estimées toutes deux dans notre modèle et de manière plus importante pour le CO₂) est d'environ deux ordres de grandeur. Cet ordonnancement des densités suggère que le flux de carbone atomique traversant l'exobase est comparable au flux de carbone atomique s'échappant, tandis que le flux de CO₂ et de CO traversant l'exobase est beaucoup plus grand que le flux d'échappement de ces constituants. Cette observation indique que la majorité du carbone issu des dissociations moléculaires provoquées par le criblage s'échappe de l'atmosphère de Mars.

Le cumul des taux d'échappement pour l'oxygène atomique tenant compte des deux sources nonthermiques étudiées donne une valeur de l'ordre de $2 \times 10^{25} s^{-1}$ au minimum d'activité solaire et de l'ordre de $9 \times 10^{25} s^{-1}$ au maximum d'activité solaire. Ces taux peuvent être comparés aux taux issus d'autres sources d'échappement non thermique, telles que l'échappement ionique ou l'échappement ionosphérique, pour lesquels quelques données sont disponibles. Les mesures réalisées par le spectromètre ASPERA lors du survol de Mars par Phobos2 dans des conditions de maximum solaire ont mis en évidence l'existence d'un échappement ionique (constitué principalement de l'ion O⁺ dans une proportion plus faible de l'ion O⁺₂) de l'ordre de $3 \times 10^{25} s^{-1}$ (Lundin et al., 1989). Les estimations issues des mesures de l'expérience TAUS indiquent un flux d'ion O⁺ dans la magnétogaine plus faible d'environ un ordre de grandeur, de l'ordre des flux d'oxygène ionique calculés par les modèles MHD et Hybrides actuels de l'interaction de vent solaire avec Mars (notamment Ma et al. (2004) et Modolo et al. (2005)).

Une étude récente de Carlsson et al. (2006) basée sur les données de l'analyseur d'ions (IMA) d'ASPERA3, indique l'existence d'un flux d'ions planétaires composé en partie d'ions CO_2^+ mesuré dans la queue magnétosphérique. Sur la base des flux d'ions O⁺ enregistrés par Phobos2 (au maximum solaire), le flux d'ions CO_2^+ est estimé à $4 \times 10^{24} \ s^{-1}$ (toutefois à partir du rapport CO_2^+/O^+ déduit des données de Mars Express, dont les conditions d'observation correspondent au minimum solaire!). Ce taux est de l'ordre de grandeur du taux d'échappement de CO_2 obtenu dans notre modèle lors du criblage au maximum d'activité solaire.

Les taux issus des différentes observations comparés à ceux que nous avons obtenus indiquent donc que les sources d'échappement ionique et ionosphérique sont moins efficaces que le criblage au maximum d'activité solaire, et que la recombinaison dissociative au minimum et au maximum d'activité solaire.

Etant donné les hypothèses simplificatrices des modèles employés pour estimer les différents taux d'échappement, il est difficile de comparer les taux cumulés que nous obtenons au taux d'échappement de Jeans de l'hydrogène, qui peut être estimé dans des conditions proches du maximum d'activité solaire à $1-1.5 \times 10^{26} s^{-1}$ (voir par exemple Lammer et al. (2003)), et de statuer sur un ratio de ces taux d'échappement que l'on puisse raisonnablement relier à une perte de la molécule d'eau. En revanche, ces valeurs indiquent que le ratio de 2:1 invoqué par McElroy (1972), n'est pas forcément irréaliste (notre ratio varie de 1.1 à 1.7 au maximum d'activité solaire), et permettent de souligner que l'intégration d'incertitudes dans les modèles est nécessaire.

La prise en compte du couplage entre les différentes sources d'échappement dans les modèles décrivant l'interaction du vent solaire avec Mars actuellement en développement, par le biais de l'ionisation et de l'accrétion par le vent solaire des espèces neutres de la couronne, permettrait par exemple de quantifier la fraction de neutres issus de la photochimie et du criblage prenant part à l'échappement ionique, de celle provenant directement de l'ionosphère. En particulier l'inclusion des espèces lourdes issues du criblage et de la photochimie peut s'avérer une piste intéressante. Johnson and Luhmann (1998) ont en outre montré l'importance du processus de rétroaction, qui correspond à l'accrétion par le champ électrique du vent solaire d'une portion du flux de neutres chauds provenant notamment du criblage, dont les constituants sont alors réinjectés sur des trajectoires dirigées vers l'exobase. Comme le montrent ces auteurs ce processus est susceptible d'augmenter l'efficacité du criblage de manière significative. A l'inverse le chauffage et l'inflation atmosphériques provoqués par le criblage peuvent diminuer cette efficacité. On voit donc bien la nécessité d'accroître le degré de description et la précision des modèles en intégrant les couplages entre la partie neutre de la haute atmosphère et le vent solaire autour de Mars. Des travaux récents ou en cours (Terada et al, communication personnelle; Chaufray et al. (2006)) s'intéressent d'ailleurs de près à cette question.

Signalons enfin une étude récente de la cavité martienne (Lundin et al., 2006) montrant l'existence à l'instar de la Terre d'une accélération de type aurorale du plasma ionosphérique à très haute altitude (au-delà de 3000km), corrélée à la géométrie des lignes de champ crustal. Les données transmises par la sonde Mars Express commencent donc à lever le voile sur la question des interactions de vent solaire avec la planète.

2.4.3 Distributions d'énergie et de vitesses



FIG. 2.23: Distributions d'énergie des atomes et molécules suprathermiques issues du criblage (graphique de droite) et de la recombinaison dissociative (graphique de gauche), moyennées entre 185km et 215km, au maximum d'activité solaire. Les limites inférieures des distributions sont fixées à 0.082eV pour O, 0.225eV pour CO₂, 0.143eV pour CO, et 0.061 eV pour C. Les triangles montrent la variation de la distribution d'oxygène selon une loi puissance en $\propto E^{-2.9}$, aux basses énergies, dans le cas du criblage.

La Figure 2.23 montre au maximum d'activité solaire les distributions d'énergies des espèces issues de chaque processus au niveau de l'exobase. Les résultats pour le minimum d'activité solaire sont présentés en annexe A. On retrouve le spectre caractéristique de la recombinaison dissociative de O_2^+ dans une gamme d'énergie inférieure à 5eV (dont la forme est similaire à celle de la distribution calculée par Krestyanikova and Shematovich (2005)), et dans le cas du criblage une population plus énergétique limitée sur le graphique à 15eV (elle s'étend en réalité sur plusieurs centaines d'eV).



FIG. 2.24: Tracé logarithmique des fonctions de distribution d'énergie normalisées, pour l'oxygène chaud issu du criblage au maximum d'activité solaire (trait rouge), et au minimum d'activité solaire (trait vert), pour l'oxygène chaud dans le cas de la recombinaison dissociative de O_2^+ au maximum solaire (trait noir), pour l'oxygène chaud issu du criblage d'une atmosphère dissociée composée d'oxygène au maximum solaire (trait mauve), et pour l'oxygène chaud issu du criblage d'une atmosphère moléculaire sans dissociations (trait jaune).

Les densités d'énergies de l'oxygène chaud obtenues au maximum d'activité solaire possèdent des maxima du même ordre pour les deux processus $(3.6 \times 10^4 cm^{-3}.ev^{-1})$ à 0.26eV dans le cas du criblage et $5.7 \times 10^4 cm^{-3}.ev^{-1}$ dans le cas de la recombinaison dissociative).

Nous avons examiné la décroissance en énergie de ces distributions pour l'oxygène, et trouvé une différence de pente notable dans le cas du criblage, par rapport à ce que prévoit l'analyse de Johnson (1990), qui donne une distribution d'énergie correspondant à l'équation (2.2). Pour réaliser ce test dans le cas de la recombinaison dissociative, nous avons exploité la distribution obtenue pour des énergies E supérieures à 1 eV, de manière à ce que les conditions de validité de (2.2) ($E_i > E$) soient respectées pour 95% de la population. Comme le montre la Figure 2.24 dans le cas du criblage (courbes rouge et verte), le terme prépondérant des polynômes ajustés aux distributions correspond bien à une variation en puissance négative de l'énergie, avec toutefois des coefficients proches de 3 (2.9 au maximum d'activité et 3.2 au minimum). Dans le cas de l'oxygène issu de la recombinaison dissociative de O_2^+ (courbe noire), la décroissance observée est proche d'une loi en $E^{-2.1}$.

Pour tenter de cerner les causes de ce comportement énergétique, nous avons effectué un test dans le cas du criblage à partir d'une atmosphère dissociée composée uniquement d'oxygène (courbe mauve). La décroissance de la distribution d'énergie dans ce cas est proche d'une loi en E^{-2} . Par ailleurs, Pospieszalska and Johnson (1996) ont simulé le criblage de l'atmosphère d'Io, satellite de Jupiter,

constituée de molécules SO₂, par une approche particulaire du type Monte Carlo. Dans cette étude les molécules sont traitées en tant qu'entités sans structure interne et interagissant dans l'approximation des sphères dures (pas de dissociations). Les auteurs ont observé une décroissance énergétique proche d'une loi en $\propto E^{-2}$ dans ce cas. Enfin nous avons effectué un second test dans lequel nous avons désactivé les dissociations dans le cas du criblage d'une atmosphère moléculaire. Dans ce cas la décroissance de la distribution est proche d'une loi en $\propto E^{-2}$ (courbe jaune).

Dans ces trois derniers cas, ainsi que dans le cas de la recombinaison dissociative de O_2^+ , la décroissance observée est donc assez proche d'une loi en $\propto E^{-2}$ (il faut en effet tenir compte des coefficients des termes d'ordre supérieur). En revanche dans le cas du criblage d'une atmosphère moléculaire, la loi observée se rapproche nettement de E^{-3} . Cette variation suggère donc l'existence d'un déficit de particules aux basses énergies (i.e. pour des énergies de l'ordre de l'eV) par rapport à la situation où l'atmosphère est entièrement dissociée.

Nous avons vu au paragraphe 2.4.1 dans le cas du criblage, qui est un processus plus énergétique que la recombinaison dissociative, que près de 50% de l'oxygène exosphérique provient de la dissociation d'une molécule de CO_2 . Il semble donc que ces dissociations soient la cause de la différence de comportement observée par rapport à la distribution théorique des particules issues de cascade de collisions, décrite par Johnson (1990) dans le cas du criblage d'une atmosphère.

Cette différence constitue donc une nouvelle signature potentiellement exploitable pour la différenciation des produits des deux processus dans l'exosphère.



FIG. 2.25: Densités de l'oxygène dans l'exosphère (correctes au-dessus de 2000km), calculées à partir d'une atmosphère moléculaire d'une part, et une atmosphère équivalente entièrement dissociée, d'autre part.

Par ailleurs ce comportement énergétique (observé à 200km d'altitude) n'est pas corrélé à une variation de l'échelle de hauteur de l'oxygène chaud, comme l'attestent les profils de densité de la Figure 2.25, obtenus à partir d'une atmosphère moléculaire d'une part, et d'une atmosphère équivalente entièrement dissociée, d'autre part. Le décalage entre ces densités provient simplement d'une efficacité du criblage plus réduite dans le cas moléculaire, ainsi que Leblanc and Johnson (2002) l'ont démontrée.

La distribution d'énergie du carbone atomique dans l'exosphère provenant du criblage est représentée sur la Figure 2.23 (graphique de droite). Nous avons vu au paragraphe 2.4.1 que l'énergie moyenne du carbone atomique issu des dissociations de CO_2 dans la thermosphère est de 23eV. On peut alors se demander quelle fraction du carbone ainsi libéré atteint l'exobase et participe à l'échappement. L'énergie d'échappement du carbone à 200km étant de 1.48eV, sa distribution d'énergie permet d'évaluer à 57% la population issue de criblage qui participe à l'échappement, le reste demeurant dans la thermosphère et participant notamment à son chauffage. Notons que cette proportion est légèrement surestimée en raison du seuil en énergie de 0.06eV (dans le cas du carbone) imposé lors du calcul afin de limiter le nombre total de macroparticules dans la simulation. Dans le cas de CO_2 , la fraction dont l'énergie est supérieure à l'énergie d'échappement à l'exobase inférieure à 0.5%. Ces proportions sont cohérentes avec la prépondérance des densités exosphériques de CO_2 et de CO observée sur la Figure 2.16 par rapport à la densité du carbone atomique. Leblanc and Johnson (2002) ont évalué la quantité totale de carbone sous forme de C, CO, et CO₂ perdue par la planète par le biais du criblage depuis l'arrêt supposé de la dynamo martienne il y a 3.7 milliards d'années. Cette perte est équivalente à une atmosphère d'environ 60mbar. Dans l'état actuel des connaissances, le criblage ne permet pas d'expliquer la disparition d'une quantité significative de carbone sur des périodes géologiques, même s'il apparaît comme l'un des mécanismes les plus efficaces de sa disparition au niveau de la haute atmosphère.



FIG. 2.26: Profils de l'énergie moyenne de O, C, CO, et CO_2 , calculés au maximum d'activité solaire dans le cas de la recombinaison dissociative (graphique de gauche) et dans le cas du criblage (graphique de droite), au-dessus de 375km.

La Figure 2.26 représente les profils d'énergies moyennes des populations énergétiques issues du

criblage et de la recombinaison dissociative de O_2^+ , en fonction de l'altitude, au maximum d'activité solaire. Les profils des molécules suprathermiques issues des collisions avec l'oxygène chaud créé par recombinaison dissociative de O_2^+ atteignent leur maximum dans une gamme d'énergie comprise entre 0.5 et 0.6 eV, entre 1000 et 1500 km, altitude à laquelle l'énergie cinétique acquise par transfert de quantité de mouvement lors des collisions commence à être dominée par l'énergie gravitationnelle de la particule. L'énergie moyenne des produits issus du criblage, comparativement grande, est en bon accord avec les résultats de Leblanc and Johnson (2001).



FIG. 2.27: Distributions des vitesses de l'oxygène et du carbone atomiques à 1000km au-dessus de la surface engendrées par le criblage (côté droit) et la recombinaison dissociative (côté gauche), dans l'espace des phases en fonction des composantes radiales et tangentielles de la vitesse (Vt est la moyenne des composantes V_{ϕ}). Les vitesses radiales moyennes sont respectivement égales à 0.31km s⁻¹ et 0.54km s⁻¹ dans le cas de l'oxygène représenté sur les graphes (a) et (b), et à 0.11km s⁻¹ et 0.59km s⁻¹ dans le cas du carbone représenté sur les graphes (c) et (d). Dans le cas de l'oxygène les valeurs des contours limitant la zone représentée sont de 10⁻¹⁴cm⁻⁶ s⁻³/10⁻¹⁸cm⁻⁶.s⁻³. Dans le cas du carbone ceux-ci sont fixés à 10⁻¹⁷cm⁻⁶ s⁻³/10⁻¹⁹cm⁻⁶ s⁻³.

Les distributions de vitesses calculées au maximum d'activité solaire pour l'oxygène et le carbone

atomiques à 1000km au-dessus de la surface sont représentées sur la Figure 2.27. Les domaines séparant les classes de particules correspondant à la théorie de Chamberlain (1978) dans l'approximation non collisionnelle de l'exosphère sont représentés par le cercle (dont le rayon correspond à la vitesse d'échappement à l'altitude considérée) et les hyperboles (qui matérialisent les particules dont la vitesse est tangentielle à la sphère de rayon égal à l'altitude de l'exobase). La présence de particules satellites (domaine à l'extérieur des hyperboles et à l'intérieur du cercle) dans le cas du criblage résulte de la présence de collisions au-dessus de l'exobase théorique qui entraînent un accroissement de la composante azimuthale de la vitesse. On distingue clairement les populations participant à l'échappement à l'extérieur du cercle pour l'oxygène atomique issu des deux processus, et pour le carbone atomique dans le cas du criblage uniquement. La forme de la distribution des vitesses obtenue dans le cas de l'oxygène est en bon accord avec celle calculée par Hodges (2000) dans le cas de la recombinaison dissociative, reflétant en particulier la présence de particules s'échappant et l'absence de particules satellites. L'effet de corotation de l'atmosphère n'est pas pris en compte dans notre modèle, mais il n'induit qu'un très léger décalage tangentiel du centre des distributions.

Comme on l'a vu dans la section 2.2.2 seul le carbone issu de la première branche de la recombinaison dissociative de CO⁺, dont l'exothermicité est de 2.90eV, est susceptible de s'échapper. Un flux d'échappement de l'ordre de $4 \times 10^{22} s^{-1}$ est effectivement observé au maximum d'activité solaire, de 2 ordres de grandeur inférieur à celui du carbone issu du criblage, et d'un ordre de grandeur plus faible que celui calculé par Fox and Hać (1999). Cependant la densité résultante dans l'espace des phases est trop faible pour apparaître à cette altitude dans la gamme représentée sur la Figure 2.27(c). Faute de temps, nous n'avons pas considéré la principale source d'échappement du carbone atomique qui provient de la photodissociation de CO. D'après les résultats obtenus par Fox and Bakalian (2001); Nagy et al. (2001), cette source produirait au maximum d'activité solaire un flux similaire à celui observé provoqué par le criblage pour le carbone, c'est-à-dire de deux ordres de grandeur supérieur à celui que nous obtenons pour la recombinaison dissociative de CO⁺. Les derniers travaux de Fox (2004) mettent également en évidence l'existence de deux sources photochimiques prépondérantes pour le carbone. D'une part la dissociation par impact électronique de CO, et d'autre part la recombinaison dissociative de CO_2^+ . La dissociation par impact électronique de CO semble dominer la recombinaison dissociative de CO⁺ sur le plan de l'échappement du carbone, d'après ces auteurs (d'un facteur 1.5 au minimum et 2.3 au maximum d'activité solaire). En revanche le carbone issu de la recombinaison dissociative de CO_2^+ ne participe à l'échappement que dans une très faible proportion (3.7% de la production), en raison du profil de production dont la décroissance entre le pic et l'exobase est très rapide, et car la molécule de O₂ issue de la seconde branche est créée avec une énergie vibrationnelle très importante. En revanche il semble que cette réaction constitue une source très importante de carbone ambiant dans la thermosphère.

La densité moyenne dans l'espace des phases du carbone exosphérique est plus faible que celle de l'oxygène d'environ deux ordres de grandeur à cette altitude. Enfin on note que le criblage entraîne une élongation radiale plus importante des flux que la recombinaison dissociative. Cette caractéristique laisse donc présager des distributions angulaires plus étroites dans le cas du criblage. Des résultats complémentaires pour les espèces lourdes sont rassemblés dans l'annexe A.

2.5 Améliorations et extensions possibles

2.5.1 Amélioration du traitement numérique des collisions

Nous citons ici quelques idées d'améliorations du code qui fut initialement développé pour l'étude du criblage. En effet les produits de la recombinaison dissociative possèdent des énergies inférieures à 5eV, donc beaucoup plus faibles que celles des ions pick-up O^+ incidents. De ce point de vue, les potentiels d'interaction utilisés pour la description des collisions impliquant des molécules pourraient être améliorés. Le potentiel de Morse employé dans le modèle (Johnson and Liu, 1998) pourrait notamment intégrer un terme d'interaction à longue portée, dont la contribution devient importante pour des énergies proches du seuil de dissociation (de l'ordre de 5eV). Le potentiel Universel utilisé pour décrire les collisions entre atomes ignore également la force faible attractive de longue portée (qui présente un intérêt aux énergies faibles). Celle-ci entraîne des collisions allongeant le temps d'interaction et par conséquent augmente la probabilité de dissociation (Johnson and Liu, 1998).

Une autre amélioration consisterait à employer des potentiels d'interaction permettant de reproduire des sections efficaces différentielles de collision dont la dépendance en énergie est plus réaliste. Comme il est montré dans Kharchenko et al. (2000), et noté par Krestyanikova and Shematovich (2005), la diffusion élastique d'atomes suprathermiques sur l'oxygène atomique (dans un domaine d'énergie de 0 à 5eV) est caractérisée par de petits angles de diffusion, ce qui peut affecter les résultats des collisions de manière significative.

2.5.2 Extensions de l'étude

L'intérêt d'une description de l'échappement de l'oxygène et du carbone tenant compte des différentes sources thermiques et non thermiques est de permettre de contraindre l'évolution du contenu en CO₂ de l'atmosphère au cours du temps. Dans un premier temps une description plus complète de la couronne carbonée et de l'échappement de ce constituant peut être obtenue dans le cadre de notre modèle, en considérant deux sources photochimiques prépondérantes pour le carbone, qui sont la photodissociation de CO et la recombinaison dissociative de CO_2^+ . Ces sources ont été identifiées grâce aux résultats de modélisation de Fox and Bakalian (2001) et Nagy et al. (2001). Leur intégration permettrait, outre une comparaison des différentes approches, de quantifier, notamment à partir de la recombinaison dissociative de CO_2^+ qui semble produire une très grande partie du carbone atomique de la haute atmosphère, l'augmentation de la fraction de carbone qui participe à l'échappement lors du criblage. Comme nous l'avons déjà évoqué, les missions actuellement en orbite autour de Mars ne sont pas en mesure de détecter les atomes neutres énergétiques, mis à part l'oxygène en dessous de 400km avec l'expérience de spectrométrie UV SPICAM-light (on peut également citer une identification en cours de l'hydrogène atomique chaud entre 400 et 5000km (Leblanc, communication personnelle), à partir du même instrument). De tels calculs serviront donc à la préparation des prochaines missions martiennes, avec en ligne de mire les propositions qui seront faites pour la plateforme MEMO (Mars Escape and Magnetic Orbiter), dans le cadre du programme Cosmic Vision de l'ESA.

2.5.2.1 La photodissociation de CO

Afin de comparer dans un premier temps nos sorties à celles de Fox and Bakalian (2001), nous considérons de même que ces auteurs comme prépondérante la branche de la photodissociation de $CO(X^1\Sigma^+)$ produisant C et O dans leur état fondamental dans la thermosphère de Mars. La molécule de CO est dissociée par des photons UV de longueur d'onde $\lambda < 1116$:

$$CO + h\nu \to C + O$$
 (2.17)

Ces espèces atomiques sont produites avec un taux q fonction de l'altitude z tel que :

$$q(z) = n_{CO}(z)\nu(0)e^{-\tau(z)}$$
(2.18)

où $n_{CO}(z)$ représente la densité de CO à l'altitude z utilisée dans notre modèle, $\nu(0)$ le taux d'ionisation au sommet de l'atmosphère que l'on prend égal à $1.25 - 2.93 \times 10^{-7} s^{-1}$ au minimum et au maximum d'activité solaire (ces valeurs sont déduites de celles données par Huebner et al. (1992) à 1UA, en supposant une atténuation du flux ionisant $\propto r^{-2}$ où r est la distance de Mars au soleil), et $\tau(z)$ l'épaisseur optique moyenne de l'atmosphère à l'altitude z sur l'intervalle de longueur d'onde des photons entraînant la dissociation de CO, c'est-à-dire [760 – 1116]. Une expression approchée de $\tau(z)$ peut être obtenue par :

$$\tau(z) = \frac{\sigma_a n_{CO}(z) H}{\cos \chi} \tag{2.19}$$

où $\sigma_a \approx 10^{-17} cm^2$ est la section efficace d'absorption moyenne de CO sur l'intervalle de longueur d'onde considéré, H = 10 km est la hauteur d'échelle de CO déduite des données Viking (pour une atmosphère isotherme en première approximation), et χ l'angle d'incidence du flux solaire par rapport à la verticale du lieu, que l'on choisit égal à 45°.

L'énergie moyenne des produits de photodissociation provient des calculs de Huebner et al. (1992) et varie (très peu) de 2.56eV à 2.58eV sur l'intervalle de longueur d'onde considéré, pour des activités solaires respectivement moyenne et maximale. Nous utilisons ces valeurs moyennes dans un premier temps. Il conviendra d'intégrer par la suite les distributions de vitesses des produits de photodissociation de CO calculées au voisinage de l'exobase par Fox and Bakalian (2001).

2.5.2.2 La recombinaison dissociative de CO_2^+

Fox (2004) a montré la prépondérance de cette réaction sur la production de carbone dans la thermosphère, en raison de l'énergie faible des produits, dont seule une faible proportion (< 3%) est susceptible de s'échapper. Nous proposons donc d'inclure cette source afin de calculer dans un premier temps la densité résultante de carbone dans la haute atmosphère, dans des conditions d'activité solaire minimum et maximum. Les profils correspondants seront par la suite intégrés dans notre modèle atmosphérique (rappelons que le carbone considéré dans la version actuelle provient uniquement des dissociations de CO et CO₂), afin de calculer de nouveaux taux d'échappement du carbone lors du criblage.

La recombinaison dissociative de l'ion CO_2^+ se produit selon les canaux énergétiques suivants :

$$CO_{2}^{+} + e^{-} \rightarrow CO + O + 8.3eV(C1)$$

$$\rightarrow C + O_{2} + 2.3eV(C2)$$

$$\rightarrow CO_{2} + 13.76eV(C3)$$

$$\rightarrow C + O + O - 2.8eV(C4)$$
(2.20)

Afin de comparer dans un premier temps nos sorties à celles de Fox (2004) nous adoptons les mêmes rapports de branchement et taux de réaction, c'est-à-dire 0.907 pour le canal (C1), de 0.093 pour (C2), et 0.0 pour (C3). Ces auteurs font en effet l'hypothèse que le canal (C3) n'est pas effectif dans l'atmosphère de Mars. Le taux de réaction utilisé est :

$$\alpha = 3.5 \times 10^{-7} (300/T_e)^{0.5} \ cm^3 \ s^{-1} \tag{2.21}$$

2.5.3 Autres sources

D'autres ions moléculaires, tels que NO^+ ou N_2^+ , peuplent l'ionosphère de Mars et se recombinent avec des électrons en produisant des atomes d'azote chauds. L'ajout de ces sources, et d'une manière générale des différentes sources identifiées dans la littérature, permettrait d'aboutir à une description plus détaillée de la couronne. Les gaz rares tels que l'argon sont également abondants dans la haute atmosphère, et il serait également intéressant d'évaluer la composante exosphérique résultant du criblage. Enfin l'étude du fractionnement isotopique gravitationnel des espèces suprathermiques, important dans le cas de l'argon et notamment sensible au criblage, constitue une piste d'étude intéressante dans le cadre de la compréhension de l'évolution sur des périodes géologiques de l'atmosphère de Mars. En résumé, dans cette partie, nous avons :

- donné un aperçu des neutres chauds dans les environnements des planètes telluriques,
- donné une description des mécanismes de criblage de l'atmosphère de Mars, et de la recombinaison dissociative des ions O_2^+ et CO^+ ,
- étendu et exploité un modèle particulaire de type Monte Carlo unique, pour simuler la production de neutres énergétiques à partir de deux sources non thermiques de différentes natures, la formation de la couronne de Mars, et l'échappement de son atmosphère, en fonction de l'activité solaire,

ce qui nous a permis:

- d'observer, entre le minimum et le maximum d'activité solaire, un facteur 2 entre les densités d'oxygènes exosphériques issues de la recombinaison dissociative, et un facteur 100 dans le cas du criblage,
- d'observer un peuplement significatif de la basse exosphère par des molécules de CO₂ et de CO, quelle que soit l'activité solaire,
- de mettre en évidence une dépendence de l'échelle de hauteur du $\rm CO_2$ exosphérique, en fonction du processus source,
- de mettre en évidence la fraction importante d'oxygène atomique issu des dissociations de CO₂, prenant part à la densité exosphérique dans le cas du criblage,
- d'estimer à environ 60% la proportion du carbone issu de la dissociation de $\rm CO_2$ s'échappant,
- d'observer que le criblage semble être un mécanisme d'échappement plus efficace que l'échappement ionique au maxium d'activité solaire, et que la recombinaison dissociative de O₂⁺ apparaît comme un mécanisme d'échappement plus efficace que l'échappement ionique au minimum et au maxium d'activité solaire,
- de caractériser des signatures exosphériques permettant de différencier le criblage de la recombinaison dissociative, pouvant aider à l'identification de ces processus par des mesures in situ,
- de quantifier les densités et distributions de vitesse des neutres énergétiques en fonction des processus et de l'activité solaire, qui nous permettrons par la suite de définir les caractéristiques d'un spectromètre de masse susceptible de les détecter.

BIBLIOGRAPHIE

Allen, M. P. and D. J. Tildesley, 1987: Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press Oxford.

- Anderson, D. E. and C. W. Hord, 1971: Mariner 6 and 7 ultraviolet spectrometer experiment: Analysis of hydrogen Lyman alpha data. J. Geophys. Res., 76, 6666–6673.
- Balakrishnan, N., E. Sergueeva, V. Kharchenko, and A. Dalgarno, 2000: Kinetics and thermalization of hot N(4S) atoms in the upper atmosphere. J. Geophys. Res., **105**, 18549–18556.
- Barth, C. A., 1971a: Exospheric Tempreature of Venus from Mariner 5. In *IAU Symp. 40: Planetary Atmospheres*, Sagan, C., Owen, T. C., and Smith, H. J., editors, p 17.
- Barth, C.-A., 1971b: Mariner 6:Ultra-Violet . IAU, 35, 31–36.
- Bertaux, J. L., J. Blamont, M. Marcelin, V. G. Kurt, N. N. Romanova, and A. S. Smirnov, 1978: Lyman-alpha observations of Venera-9 and 10. I - The non-thermal hydrogen population in the exosphere of Venus. *Planetary and Space Science*, 26, 817–831.
- Bird, G. A., 1994: Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Clarendon Press Oxford.
- Bisikalo, D. V., V. I. Shematovich, and J.-C. Gerard, 1995: A kinetic model of the formation of the hot oxygen geocorona. 2: Influence of O(+) ion precipitation. J. Geophys. Res., 100, 3715–3720.
- Bougher, S. W., S. Engel, D. P. Hinson, and J. R. Murphy, 2004: MGS Radio Science electron density profiles: Interannual variability and implications for the Martian neutral atmosphere. *Journal of Geophysical Research (Planets)*, **109**(E18), p 3010.
- Bougher, S.W., and H. Shinagawa, 1998: The mars thermosphere-exosphere: predictions for the arrival of planet b. *Earth Planet. Space*, **50**.
- Brecht, S. H., 1997: Hybrid simulations of the magnetic topology of Mars. J. Geophys. Res., **102**(11), 4743–4750.

- Carlsson, E., A. Fedorov, S. Barabash, and . co authors, 2006: Mass composition of the escaping plasma at Mars. *Icarus*.
- Chamberlain, 1963: Planetary coronae and atmospheric evaporation. *Planetary and Space Science*, **11**, p 901.
- Chamberlain, J. W., 1978: Theory of Planetary Atmosphere. Academic Press New York.
- Chassefière, E. and F. Leblanc, 2004: Mars atmospheric escape and evolution; interaction with the solar wind. *Planetary and Space Science*, **52**, 1039–1058.
- Chaufray, J. Y., R. Modolo, F. Leblanc, and G. Chanteur, 2006: Non thermal effects on the oxygen escape at Mars at low and high solar activities. *Icarus*, **En préparation**.
- Cotton, D. M., G. R. Gladstone, and S. Chakrabarti, 1993: Sounding rocket observation of a hot atomic oxygen geocorona. J. Geophys. Res., 98, p 21651.
- Cravens, T. E., A. Hoppe, S. A. Ledvina, and S. McKenna-Lawlor, 2002: Pickup ions near Mars associated with escaping oxygen atoms. *Journal of Geophysical Research (Space Physics)*, **107**, 7–1.
- De La Haye, V., J. F. Waite Jr, R. V. Yelle, R. E. Johnson, M. Michael, F. Leblanc, J. G. Luhmann, S. A. Ledvina, T. E. Cravens, I. P. Robertson, and R. L. McNutt, 2006: Titan's corona : presence of suprathermal mechanisms based on the Cassini INMS data and comparison with the extent of the corona produced by exothermic chemistry. *Icarus*, En préparation.
- Fahr, H. J. and B. Shizgal, 1983: Modern exospheric theories and their observational relevance. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 21, 75–124.
- Fedorov, A., E. Budnik, and . co authors, In Press: Structure of he martian wake. Icarus.
- Fox, J. L., 1997: Upper limits to the outflow of ions at Mars: Implications for atmospheric evolution. Geophys. Res. Let., 24, p 2901.
- Fox, J. L., 2004: CO2+ dissociative recombination: A source of thermal and nonthermal C on Mars. Journal of Geophysical Research (Space Physics), 109(A18), p 8306.
- Fox, J. L. and F. M. Bakalian, 2001: Photochemical escape of atomic carbon from Mars. J. Geophys. Res., 106, 28785–28796.
- Fox, J. L. and A. Dalgarno, 1979: Ionization, luminosity, and heating of the upper atmosphere of Mars. J. Geophys. Res., 84(13), 7315–7333.
- Fox, J. L. and A. Hać, 1997: Spectrum of hot O at the exobases of the terrestrial planets. J. Geophys. Res., 102(11), p 24005.
- Fox, J. L. and A. Hać, 1997: The 15N/14N isotope fractionation in dissociative recombination of N2+. J. Geophys. Res.", 102(11), 9191–9204.

- Fox, J. L. and A. Hać, 1999: Velocity distributions of C atoms in CO+ dissociative recombination: Implications for photochemical escape of C from Mars. J. Geophys. Res., **104**(13), 24729–24738.
- Gérard, J. C., P. G. Richards, V. I. Shematovich, and D. V. Bisikalo, 1995: The importance of new chemical sources for the hot oxygen geocorona. *Geophys. Res. Let.*, **22**, 279–282.
- Hanson, W. B., S. Sanatani, and D. R. Zuccaro, 1977: The Martian ionosphere as observed by the Viking retarding potential analyzers. J. Geophys. Res., 82(11), 4351–4363.
- Hodges, R. R., 2000: Distributions of hot oxygen for venus and mars. J. Geophys. Res., 105.
- Hodges, R. R., 2002: The rate of loss of water from mars. Geophys. Res. Let., 29, 8–1.
- Huebner, W. F., J. J. Keady, and S. P. Lyon, 1992: Solar photo rates for planetary atmospheres and atmospheric pollutants. Astrophysics ans Space Science, 195, 1–289.
- Jakosky, B. M., 1991: Mars volatile evolution Evidence from stable isotopes. Icarus, 94, 14-31.
- Johnson, R. E., 1990: Energetic Charged-Particle Interactions with Atmospheres and Surfaces. Energetic Charged-Particle Interactions with Atmospheres and Surfaces, X, 232 pp. 84 figs., 28 tabs.. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York. Also Physics and Chemistry in Space, volume 19.
- Johnson, R. E. and F. Leblanc, 2001: The Physics and Chemistry of Sputtering by Energetic Plasma Ions. Astrophysics and Space Science, 277, 259–269.
- Johnson, R. E. and M. Liu, 1998: Sputtering of the atmosphere of Mars. I Collisional dissociation of CO2. Journal of Geophysical Research (Planets), **103**(12), 3639–+.
- Johnson, R. E., M. Liu, and C. Tully, 2002: Collisional dissociation cross section for O+O2, CO and N2, O2+O2, N+N2, and N2+N2. *Planetary and Space Science*, **50**, 123–128.
- Johnson, R. E. and J. G. Luhmann, 1998: Sputter contribution to the atmospheric corona on Mars. J. Geophys. Res., 103(12), p 3649.
- Kabin, K. and B. D. Shizgal, 2002: Velocity distributions of energetic atoms in planetary exospheres from dissociative recombination. *Journal of Geophysical Research (Planets)*, **107**(E7), 7–1.
- Kaplan, J., 1931: The Light of the Night Sky. Physical Review, 38, 1048–1051.
- Kass, D. M. and Y. L. Yung, 1995: Loss of Atmosphere from Mars due to Solar Wind-Induced Sputtering. Science, 268, 697.
- Kella, D., P. J. Johnson, H. B. Pedersen, L. Vejby-Christensen, and L. H. Andersen, 1997: The source of green light emission determined from a heavy-ion storage ring experiment. *Science*, 276, 1530–1533.
- Kharchenko, V., A. Dalgarno, B. Zygelman, and J.-H. Yee, 2000: Energy transfer in collisions of oxygen atoms in the terrestrial atmosphere. J. Geophys. Res., 105(14), 24899–24906.

- Kim, J., A. F. Nagy, J. L. Fox, and T. E. Cravens, 1998: Solar cycle variability of hot oxygen atoms at Mars. J. Geophys. Res., 103(12), 29339–29342.
- Krasnopolsky, V. A., 2002: Mars' upper atmosphere and ionosphere at low, medium, and high solar activities: Implications for evolution of water. *Journal of Geophysical Research (Planets)*, **107**(E12), 11–1.
- Krasnopolsky, V. A. and P. D. Feldman, 2001: Detection of Molecular Hydrogen in theAtmosphere of Mars. Science, 294, 1914–1917.
- Krasnopolsky, V. A., M. J. Mumma, and G. Randall Gladstone, 1998: Detection of Atomic Deuterium in the Upper Atmosphere of Mars. *Science*, 280, p 1576.
- Krestyanikova, M. A. and V. I. Shematovich, 2005: Stochastic models of hot planetary and satellite coronas: a photochemical source of hot Oxygen in the upper atmosphere of Mars. *Solar System Research*, **39**, 22–32.
- Krymskii, A. M., T. K. Breus, N. F. Ness, D. P. Hinson, and D. I. Bojkov, 2003: Effect of crustal magnetic fields on the near terminator ionosphere at Mars: Comparison of in situ magnetic field measurements with the data of radio science experiments on board Mars Global Surveyor. *Journal* of Geophysical Research (Space Physics), 108, 5–1.
- Lammer, H. and S. J. Bauer, 1991: Nonthermal atmospheric escape from Mars and Titan. J. Geophys. Res., 96, 1819–1825.
- Lammer, H., H. I. M. Lichtenegger, C. Kolb, I. Ribas, E. F. Guinan, R. Abart, and S. J. Bauer, 2003: Loss of water from Mars:Implications for the oxidation of the soil. *Icarus*, 165, 9–25.
- Leblanc, F. and R. E. Johnson, 2001: Sputtering of the Martian atmosphere by solar wind pick-up ions. *Planetary and Space Science*, **49**, 645–656.
- Leblanc, F. and R. E. Johnson, 2002: Role of molecular species in pickup ion sputtering of the Martian atmosphere. *Journal of Geophysical Research (Planets)*, **107**(E2), 5–1.
- Luhmann, J. G., R. E. Johnson, and M. H. G. Zhang, 1992: Evolutionary impact of sputtering of the Martian atmosphere by O(+) pickup ions. J. Geophys. Res., 19, 2151–2154.
- Luhmann, J. G. and J. U. Kozyra, 1991: Dayside pickup oxygen ion precipitation at Venus and Mars Spatial distributions, energy deposition and consequences. J. Geophys. Res, **96**(15), 5457–5467.
- Lundin, R. and S. Barabash, 2004: Evolution of the Martian atmosphere and hydrosphere: Solar wind erosion studied by ASPERA-3 on Mars Express. *Planetary and Space Science*, **52**, 1059–1071.
- Lundin, R., S. Barabash, H. Andersson, M. Holmström, A. Grigoriev, M. Yamauchi, J.-A. Sauvaud, A. Fedorov, E. Budnik, J.-J. Thocaven, D. Winningham, and 34 co-authors, 2004: Solar Wind-Induced Atmospheric Erosion at Mars: First Results from ASPERA-3 on Mars Express. *Science*, 305, 1933–1936.

- Lundin, R., H. Borg, B. Hultqvist, A. Zakharov, and R. Pellinen, 1989: First measurements of the ionospheric plasma escape from Mars. *Nature*, **341**, 609–612.
- Lundin, R., H. Borg, B. Hultqvist, A. Zakharov, and R. Pellinen, 1990: First measurements of the ionospheric plasma escape from Mars. *Nature*, **341**, 609–612.
- Lundin, R., D. Winningham, S. Barabash, R. Frahm, M. Holmström, J.-A. Sauvaud, A. Fedorov, K. Asamura, A. J. Coates, Y. Soobiah, K. C. Hsieh, and 13 co-authors, 2006: Plasma Acceleration Above Martian Magnetic Anomalies. *Science*, **311**, 980–983.
- Ma, Y., A. F. Nagy, I. V. Sokolov, and K. C. Hansen, 2004: Three-dimensional, multispecies, high spatial resolution MHD studies of the solar wind interaction with Mars. *Journal of Geophysical Research (Space Physics)*, **109**(A18), p 7211.
- McElroy, M. B., 1972: Mars: An Evolving Atmosphere. Science, 175, 443–445.
- Mehr, F. J. and M. A. Biondi, 1969: Electron Temperature Dependence of Recombination of O2+ and N2+ Ions with Electrons. *Physical Review*, **181**, 264–271.
- Modolo, R., G. M. Chanteur, E. Dubinin, and A. P. Matthews, 2005: Influence of the solar EUV flux on the Martian plasma environment. *Annales Geophysicae*, **23**, 433–444.
- Modolo, R., J.-Y. Chaufray, F. Leblanc, and G. Chanteur, 2004: Impacting flux and associated sputtering effects at Mars. In *35th COSPAR Scientific Assembly*, p 3018.
- Nagy, A. F. and T. E. Cravens, 1988: Hot oxygen atoms in the upper atmospheres of Venus and Mars. *Geophys. Res. Let.*, 15, 433–435.
- Nagy, A. F., T. E. Cravens, J.-H. Yee, and A. I. F. Stewart, 1981: Hot oxygen atoms in the upper atmosphere of Venus. *Geophys. Res. Let.*, 8, 629–632.
- Nagy, A. F., M. W. Liemohn, J. L. Fox, and J. Kim, 2001: Hot carbon densities in the exosphere of Mars. J. Geophys. Res., 106(15), 21565–21568.
- Nair, H., M. Allen, A. D. Anbar, Y. L. Yung, and R. T. Clancy, 1994: A photochemical model of the martian atmosphere. *Icarus*, **111**, 124–150.
- Nanbu, K., 2000: Probability Theory of Electron-Molecule, Ion-Molecule, Molecule-Molecule, and Coulomb Collisions for Particles Modeling of Materials Processing Plasmas and Gases. *IEEE Tran*saction on Plasma Science, 28(3), 971–990.
- Oen, O. S. and M. T. Robinson, 1976: Computer studies of the scattering of low energy hydrogen ions from poly-crystalline solids. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., 132, 647–653.
- Paxton, L. J., 1983: Atomic carbon in the Venus thermosphere: Observations and theory. Ph.D. Thesis.

- Petrignani, A., W. J. van der Zande, P. C. Cosby, F. Hellberg, R. D. Thomas, and M. Larsson, 2005: Vibrationally resolved rate coefficients and branching fractions in the dissociative recombination of O⁺₂. J. Chemical Physics, **122**, 014302.
- Peverall, R., S. Rosen, J. R. Peterson, M. Larsonn, A. Al-Khalili, L. Vikor, J. Semaniak, R. Bobbenkamp, A. N. Le Padellec, and W. J. Van der Zande, 2001: Dissociative recombination and excitation of O2+:Cross sections, products yields and implications for studies of ionospheric airglows. J. Chemical Physics, 114(15), p 6679.
- Pospieszalska, M. K. and R. E. Johnson, 1996: Monte Carlo calculations of plasma ion-induced sputtering of an atmosphere: SO2 ejected from Io. J. Geophys. Res., 101, 7565–7574.
- Rohrbaugh, R. P., J. S. Nisbet, E. Bleuler, and J. R. Herman, 1979: The effect of energetically produced O2/+/ on the ion temperatures of the Martian thermosphere. J. Geophys. Res., 84, 3327–3338.
- Rosen, S., R. Peverall, M. Larsson, and . co authors, 1998: Absolute cross sections and final-state distributions for dissociative recombination and excitation of CO+, using an ion storage ring. *Phys. Review A*, 57, 4462–4470.
- Sheehan, C. H. and J. P. St-Maurice, 2004: Dissociative recombination of N2+, O2+, and NO+: Rate coefficients for ground state and vibrationnaly excited ions. *J. Geophys. Res.*, **109**.
- Shematovich, V. I., D. V. Bisikalo, and J. C. Gerard, 1994: A kinetic model of the formation of the hot oxygen geocorona. 1: Quiet geomagnetic conditions. J. Geophys. Res., 99, p 23217.
- Spreiter, J. R. and S. S. Stahara, 1980: A new predictive model for determining solar wind-terrestrial planet interactions. J. Geophys. Res., 85(14), 6769–6777.
- Takacs, P. Z., A. L. Broadfoot, G. R. Smith, and S. Kumar, 1980: Mariner 10 observations of hydrogen Lyman alpha emission from the Venus exosphere - Evidence of complex structure. *Planetary and* Space Science, 28, 687–701.
- Takahashi, H., B. R. Clemesha, P. P. Batista, Y. Sahai, M. A. Abdu, and P. Muralikrishna, 1990: Equatorial f-region oi 6300 å and oi 5577 å emission profiles observed by rocket-borne airglow photometers. *Planetary and Space Science*, 38, 547–554.
- Thompson, M. W., 1968: Energy spectrum of ejected atoms during high energy sputtering of gold. *Phil. Mag.*, 18, 377–414.
- Thompson, M. W., 1991: Energy spectrum of ejected atoms during high energy sputtering of gold. *Phil. Mag.*, 18, 377–414.
- Vignes, D., C. Mazelle, H. Rme, M. H. Acuña, J. E. P. Connerney, R. P. Lin, D. L. Mitchell, P. Cloutier, D. H. Crider, and N. F. Ness, 2000: The solar wind interaction with Mars: Locations and shapes of the Bow Shock and the magnetic pile-up boundary from the observations of the MAG/ER experiment onboard Mars Global Surveyor. *Geo. Res. Let.*, 27, 49–52.

- Watson, C. C., P. K. Haff, and T. A. Tombrello, 1980: Solar wind sputtering effects in the atmospheres of Mars and Venus. In *Lunar and Planetary Science Conference*, 2479-2502.
- Yee, J. H. and P. B. Hays, 1980: The oxygen polar corona. J. Geophys. Res., 85(14), 1795–1799.
- Zahnle, K. J. and J. C. G. Walker, 1982: The evolution of solar ultraviolet luminosity. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 20, 280–292.
- Zhang, M. H. G., J. G. Luhmann, S. W. Bougher, and A. F. Nagy, 1993: The ancient oxygen exosphere of Mars Implications for atmosphere evolution. *J. Geophys. Res.*, **98**(17), p 10915.
- Zhang, M. H. G., J. G. Luhmann, and A. J. Kliore, 1990: An observational study of the nightside ionospheres of Mars and Venus with radio occultation methods. J. Geophys. Res., 95(14), 17095– 17102.
- Ziegler, J. F., J. P. Biersack, and U. Littmark, 1985: *The Stopping and Range of Ions in Solids*. The Stopping and Range of Ions in Matter, Pergamon, New York.

Deuxième partie

Les sources d'électrons à effet de champ: présentation et caractérisation des cathodes à micropointes et à nanotubes de carbone La théorie, c'est quand on sait tout, et que rien ne fonctionne. La pratique, c'est quand tout fonctionne, et que personne ne sait pourquoi. Ici, nous avons réuni théorie et pratique : Rien ne fonctionne... et personne ne sait pourquoi!

Albert Einstein

La couronne de neutres chauds qui entoure Mars revêt une importance majeure pour l'interaction de la planète avec le vent solaire, et pour l'évolution à long terme de son atmosphère. Comprendre les processus physiques et chimiques qui sont mis en jeu et déterminer avec une précision suffisante leur rôle et leur effet sur l'érosion de l'atmosphère focalisent l'intérêt de la communauté scientifique dans ce domaine, comme le montre les objectifs retenus en priorité dans le projet DYNAMO, soumis au CNES par les équipes de l'IPSL il y a quelques années, et MEMO, proposé récemment à l'ESA dans le cadre du programme Cosmic Vision.

Les résultats de la partie précédente nous permettent de constater que la détection des particules neutres suprathermiques de la couronne martienne pose deux problèmes : d'une part, la gamme d'énergie puisque, comme on l'a montré, l'essentiel de la distribution se situe en dessous de 10 à 15 eV ; d'autre part, les faibles densités, et donc les flux très faibles que l'on peut attendre à l'entrée de l'instrument.

Les particules d'énergie inférieure à environ 10eV ne peuvent pas être détectées directement par les détecteurs classiques, comme les galettes à microcanaux, ou indirectement, après capture d'un électron au cours de l'impact sur une cible, puis par détection de l'ion négatif ainsi formé. En effet, le seuil de détection directe pour les neutres ou les ions est voisin de 100eV, et l'efficacité de capture d'un électron est extrêmement faible au dessous de 20eV (Barat et al., 2000; Helbing et al., 1975). On est donc réduit à appliquer la technique classique de spectrométrie de masse, qui consiste dans notre cas à ioniser les particules par impact électronique. Cependant, la faible densité des neutres suprathermiques nécessite une source de très grande luminosité, largement au-delà des valeurs classiques de 10^{-4} à $10^{-5}A/torr$ des meilleurs spectromètres de masse embarqués (Balsiger et al., 1998). On verra par exemple dans la troisième partie qu'avec une telle sensibilité on obtiendrait des comptages sur un détecteur de l'ordre de $0.3 \text{ c.} s^{-1} \cdot cm^{-2}$ à une altitude de 400 km au maximum d'activité solaire, à comparer avec un niveau typique de bruit de fond de 1 c. $s^{-1} \cdot cm^{-2}$.

Atteindre un niveau de flux détectable nécessite par conséquent d'augmenter la luminosité des sources de 2 voire 3 ordres de grandeurs, et donc le courant d'électrons ionisants dans des proportions similaires. Au sol, il est possible d'atteindre ces performances avec des filaments chauffés classiques en Tungstène, recouverts d'oxydes à fort pouvoir émissif, mais au prix de puissances supérieures à 10 Watts, irréalistes pour des applications spatiales.

Nous avons donc été conduits à nous intéresser à des émetteurs d'électrons par effet de champ, qui ont été développés depuis une quinzaine d'années pour la réalisation d'écrans plats. Ces composants (cathodes à micropointes et plus récemment à nanotubes de carbone) peuvent émettre des courants forts, de l'ordre de quelques mA, avec une consommation minimale puisqu'il n'y a pas de chauffage. Ils présentent en outre l'avantage de travailler à température ambiante, donc ne provoquent pas de dégazage dans la source, ce qui laisse présager qu'une diminution notable du bruit de fond de la mesure, dû en partie à l'ionisation du gaz désorbé par les parois de la source, peut être obtenue.

Dans le premier chapitre, nous présentons deux types d'émetteurs à effet de champ que nous avons pu essayer au laboratoire : les cathodes à micropointes en Molybdène, et les cathodes à nanotubes de carbone, ainsi que leur principe de fonctionnement, et les principaux résultats publiés à ce jour. Dans le second chapitre nous décrivons l'instrumentation que nous avons développée pour déterminer les caractéristiques principales (spectre en énergie et distribution angulaire) des électrons émis, dont la connaissance est indispensable pour concevoir et optimiser les sources d'ionisation. Nous présentons dans un troisième et dernier chapitre les résultats obtenus et leur interprétation.

CHAPITRE 3______Les émetteurs d'électrons à effet de champ

3.1 Les cathodes à micropointes

3.1.1 Description et procédé de réalisation

La première réalisation de cathodes à micropointes est due à Spindt (1968), du Stanford Research Institute, Californie. En France, les études menées par le LETI ont eu pour objectifs la recherche d'autres matériaux pour fabriquer les micro-pointes, et surtout la réalisation de structures matricielles de grandes dimensions destinées à équiper les écrans plats.



FIG. 3.1: Principe de fabrication des micropointes, tiré de Constancias (1998).

La fabrication d'un composant (illustrée par la Figure 3.1), passe par la réalisation de 4 couches qui sont (4) le substrat, (3) le conducteur cathodique, (2) la silice, (1) le niobium de grille, et suit les étapes suivantes :

- Photogravure et gravure ionique de la grille, (couche 1)

- Gravure de la silice, (couche 2)
- Evaporation de la couche de séparation,
- Evaporation des pointes en Molybdène,
- Dissolution électrochimique de la couche de séparation.



FIG. 3.2: Structure des électrodes de l'unité émettrice et schéma électrique équivalent. Le comportement électronique des parties résistives (les couches de silice et de silicium) est modélisé par une impédance $Z = \frac{R}{1+jRC\omega}$.

La structure de l'unité émettrice des cathodes (la pointe) est schématisée sur la Figure 3.2. Le Molybdène a été retenu parce qu'il permet une bonne reproductibilité du processus de fabrication au niveau industriel (voir Spindt et al. (1976)). Les pointes sont des cônes dont le diamètre de base et la hauteur sont de $1\mu m$, et dont le rayon de courbure au sommet de la pointe est de l'ordre de quelques dizaines de nm. Elles sont positionnées au centre de trous d'un diamètre moyen de $1.4\mu m$, dans une couche de silice de $1\mu m$ d'épaisseur, sur laquelle est déposée une couche de $0.4\mu m$ de Niobium (Figure 3.3). Cette dernière constitue la grille d'extraction.



FIG. 3.3: Détail d'un pixel, observé au MEB (F. Muller, CEA/LETI), montrant les ouvertures de grilles ($\phi \sim$ 1.4µm) au centre desquelles on voit apparaître les pointes.

Le sommet des pointes est situé au niveau de la grille, ce qui permet d'abaisser la tension minimale d'extraction à quelques dizaines de volts, de manière à produire un champ extracteur de l'ordre de $3.10^9 V.m^{-1}$, nécessaire pour initier l'émission par effet de champ. La base des pointes est en contact avec une couche de silicium de $0.8\mu m$ d'épaisseur. Cette couche joue un double rôle de protection des pointes, et d'homogénéisation de l'émission (Baptist et al., 1997). Dans son épaisseur sont noyés des contacts cathodiques en Niobium de $0.2\mu m$ d'épaisseur, qui permettent les contacts extérieurs.

Pour l'application aux écrans plats, les composants ont une structure matricielle illustrée sur la Figure 3.4 où les pointes sont regroupées en 20 colonnes de 88 unités pour former un *pixel*, d'environ

FIG. 3.4: Matrice de 1024 pixels de $0.35 \times 0.35 \mu m^2$, maintenue par une technique de bonding sur un support PGA (Pin Grid Array).



 $350\mu m$ de côté. Les contacts de *grilles* sont disposés suivant 32 *lignes*, chacune correspondant à un alignement de 32 pixels. Les contacts cathodiques sont disposés suivant 32 *colonnes*, chacune correspondant à un alignement de 32 pixels, orthogonal aux *grilles*. Ces 64 pistes permettent le raccordement électrique du composant à des alimentations extérieures.

3.1.2 L'émission par effet de champ

La théorie quantique décrivant l'émission d'électrons à partir d'un métal est fondée sur le modèle des électrons libres du métal, proposé par Sommerfeld [1928]. Dans un métal la distribution en énergie des électrons se caractérise par des bandes de conduction et de valence partiellement remplies ou se chevauchant (voir par exemple Wang (1980)), correspondant au recouvrement des fonctions d'ondes électroniques des atomes du cristal.

Les électrons libres sont des fermions, car on fait l'hypothèse qu'ils ne subissent pas d'interactions réciproques, et sont soumis au principe d'exclusion de Pauli. Leur distribution en énergie est décrite par la statistique de Fermi-Dirac (Kittel, 1983):

$$f(E) = \frac{1}{(1 + exp[\frac{(E - E_F)}{k_B T}])}$$
(3.1)

où k_B est la constante de Boltzmann, T la température absolue, et E_F le niveau de Fermi. L'expression (3.1) montre qu'au zéro absolu, les états d'énergies $E > E_F$ sont vides, et, ceux d'énergies $E < E_F$ sont occupés au maximum. Pour $T \neq 0$ et $E = E_F$, on peut également noter que la probabilité d'occupation est $\frac{1}{2}$. A l'intérieur du métal la neutralité électrique impose un équilibre entre les charges positives (les noyaux) et les charges négatives (les électrons). Au voisinage de la surface, le mouvement de quelques électrons libres vers le vide crée un déficit de charges négatives sous la surface, et donc l'apparition d'une variation brusque du potentiel au passage de la surface de transition métal-vide. En prenant le vide loin de la surface comme origine des potentiels, cette variation entraîne l'existence d'une barrière de potentiel représentée sur la Figure 3.5, en terme d'énergie potentielle des électrons $E = -e\Phi$ où Φ est le potentiel. La hauteur Φ_s de cette barrière, c'est-à-dire la différence de potentiel entre le niveau de Fermi et celui de l'interface, est appelée travail de sortie, et correspond à l'énergie



FIG. 3.5: Energie potentielle à la transition métal-vide. L'origine des potentiels est prise dans le vide, loin de la surface du métal. Φ_s , le travail de sortie, représente l'énergie minimale à fournir pour permettre à un électron de quitter le métal.

minimale à fournir pour permettre à un électron de quitter le métal. Cette grandeur dépend de l'état de surface, et notamment de sa pollution par des gaz adsorbés par exemple.

L'effet tunnel est une conséquence de la mécanique quantique, et exprime qu'un électron d'énergie inférieure à E_F a une probabilité non nulle de passer à travers cette barrière de potentiel. Pour comprendre cet effet, on peut écrire la fonction énergie potentielle des électrons de part et d'autre de la région de transition, en présence d'un champ électrique extérieur **F**, en se ramenant au cas 1D de la Figure 3.6.



FIG. 3.6: Déformation de la barrière de potentiel sous l'action d'un champ électrique \mathbf{F} (Constancias, 1998).

Le champ électrostatique **F** impose une force attractive -e**F**. Lorsque l'électron quitte sa position de repos en laissant un excès de charge positive, il est retenu par une force $\frac{-e^2}{16\pi\epsilon_0 z^2}$ (potentiel image).

L'énergie potentielle à l'extérieur du métal prend alors la forme :

$$V(z) = E_F + \Phi_s - eFz - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 4z}$$

$$(3.2)$$

Les différentes contributions de sa variation sont représentées sur la Figure 3.6. La largeur de la barrière de potentiel $z_1 z_2$ est finie quelque soit l'énergie des électrons. La probabilité de passage d'un électron est alors donnée par le coefficient de transmission D à travers la barrière, c'est-à-dire par le rapport des carrés des modules des fonctions d'ondes électroniques Ψ de part et d'autre ($\Psi(z_1)$ et $\Psi(z_2)$). Pour calculer ces fonctions d'ondes on ne considère que la composante de l'énergie normale à la surface, notée W, et il s'agit alors de résoudre l'équation de Shrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dz^2} + V(z)\Psi = W\Psi$$
(3.3)

Une solution classique en ondes planes de (3.3), donnée par exemple dans Constancias (1998), permet d'aboutir au coefficient de transmission :

$$D(W) = \frac{|\Psi(z_2)|^2}{|\Psi(z_1)|^2} = exp\left\{-\int_{z_1}^{z_2} \sqrt{\frac{8m}{\hbar^2}[V(z) - W]}dz\right\}$$
(3.4)

et on voit en particulier que D(W) > 0 (les électrons ont une probabilité non nulle de passage) lorsque W < V(z).

3.1.3 Densité de courant émis et loi de Fowler-Nordheim

Quantitativement, l'expression théorique du courant émis par effet de champ à partir d'un métal a été obtenue par Fowler and Nordheim (1928), à partir de la description de l'effet tunnel, et du calcul du nombre d'électrons par unité de volume traversant la barrière. La formulation 1D permet de décrire l'émission à partir de surfaces métalliques planes idéales (le système expérimental correspondant est un condensateur plan), et d'établir une expression reliant la densité du courant émis au champ à la surface. Dans le cas des pointes, l'approximation de surface plane infinie est justifiée tant que le rayon de courbure r_c est supérieur à 10 nm, ce qui est le cas des cathodes à micropointes fabriquées par le LETI, dont le rayon de courbure est de l'ordre de 10 à 15 nm (Constancias, 1998). La densité de courant traversant la surface est obtenue par intégration de la fonction de distribution suivant l'énergie normale à la surface :

$$J = e \int_0^\infty P(W) dW \tag{3.5}$$

où P(W), le flux d'électrons avec une énergie normale comprise entre W et W + dW émergeant de la surface, est le produit du flux N(W) d'électrons atteignant la barrière dans cette tranche d'énergie, par le coefficient de transmission D(W). L'intégration de cette fonction mène à la loi d'émission de Fowler-Nordheim, qui s'exprime sous la forme (Constancias, 1998):

$$J(F,\Phi_s) = \frac{1,54.10^{-6}}{1,1\Phi_s} F^2 \exp\left(\frac{9,83F}{\sqrt{\Phi_s}}\right) \exp\left(-6,49.10^9 \frac{\Phi_s^{3/2}}{F}\right)$$
(3.6)

83

où J représente la densité de courant émis en $A.m^{-2}$, F le module du champ électrique à la surface émettrice de la pointe en $V.m^{-1}$, et Φ_s le travail de sortie du matériau de la cathode (Molybdène), en eV. Le calcul des coefficients de (3.6) utilise une approximation pour certaines intégrales elliptiques, ce qui limite sa validité à un intervalle de champ extracteur F de $2.10^9 V.m^{-1}$ à $10^{10} V.m^{-1}$. L'influence de la température sur l'émission a été introduite par Good and Müller (1956), et se traduit par une pondération sous la forme :

$$J(F, \Phi_s, T) = J(F, \Phi_s) \cdot \frac{\pi k_B T/d}{\sin(\pi k_B T/d)}$$
(3.7)

où T est la température en Kelvin, $J(F,\Phi_s)$ est le courant pour T=0K, et d une fonction de F et Φ , exprimée en eV (Brenac et al., 1987):

$$d = 0,93.10^{-10} \frac{F}{\sqrt{\Phi_s}} \tag{3.8}$$

Cette loi reste valable dans un domaine $k_BT < d$, ce qui est réalisé en pratique à température ambiante où $k_BT = 0,0259eVet d = 0,087eV$ pour la limite inférieure de F. Sous l'effet de la température des électrons peuvent peupler les états d'énergies supérieurs au niveau de Fermi, et éventuellement franchir la barrière, dès que le champ électrique le permet. Au-delà d'environ 1500K, leur énergie devient suffisante pour sortir du métal sans qu'il y ait de champ électrique de surface : c'est l'effet thermoïonique. A température ambiante, l'influence de la température sur l'émission est négligeable. A l'inverse l'émission par effet de champ influe sur la température. D'une part, l'effet Joule est d'autant plus intense que le taux de défauts cristallins (résistivité) et la densité de courant augmentent. D'autre part, si la différence d'énergie moyenne entre les électrons émis et les électrons de remplacement du métal est positive, la cathode se refroidie. Dans le cas contraire, il y a échauffement de la cathode (cet effet porte le nom d'effet Nottingham). Le passage du premier au second cas se situe à une température critique voisine de 1500K.

Le courant émis par une pointe Ip est égal à $Ip = J(F, \Phi) \cdot Sp$, où Sp représente la surface émissive de la pointe. Dans la pratique on cherche à introduire ,à la place de F, la tension d'extraction Vgp qui est la différence de potentiel entre la grille d'extraction et la pointe. Le rapport entre le champ moyen de surface F et Vgp est appelé facteur de champ, et noté usuellement β , soit $F = \beta \cdot Vgp$. Les cathodes de type Spindt fabriquées par le LETI possèdent un facteur de champ moyen évalué à $5.10^7 m^{-1}$ (valeur tirée de Constancias (1998)). β dépend de la dispersion des paramètres géométriques des couples pointes/grilles (hauteur de pointe, rayon de courbure, inclinaison, distance à l'ouverture de grille, diamètre du trou).

Il ne faut pas confondre le paramètre β avec le facteur d'amplification du champ électrique, c'està-dire $F = \gamma F_0$ où $F_0 = Vgp/D$ (D est la distance grille-pointe), qui traduit le tassement des équipotentielles au voisinage de la surface de la pointe, et se désigne communément par le nom d'effet de pointe.

En pratique la relation entre le courant émis par une cathode et la tension d'extraction Vgp s'écrit donc :

$$Ip = aVgp^2 \exp\left(\frac{-b}{Vgp}\right) \tag{3.9}$$

où les expressions des coefficients a et b, fonctions de β , ϕ , et Sp, sont facilement dérivables de la relation (3.6):

$$a = Sp \frac{1.54 \times 10^{-6}}{1.1\phi} \exp\left(\frac{9.84}{\sqrt{\phi}}\right) \beta^2$$
(3.10)

 et

$$b = \frac{2.82 \times 10^9 \phi^{3/2}}{\beta} \tag{3.11}$$

La relation (3.9), qui sous la forme $\log \frac{I}{V^2} = f\left(\frac{1}{V}\right)$ est appelée droite de Fowler-Nordheim, est exploitée expérimentalement pour l'étude des caractéristiques des émetteurs à effet de champ. Elle est utile pour étudier l'influence des paramètres β , Φ , et Sp au sens macroscopique, c'est-à-dire en considérant les valeurs moyennes sur l'ensemble des pointes participant à l'émission.

Son évolution pendant la période de rodage des pointes, au cours de laquelle le courant émis à tension d'extraction fixe évolue jusqu'à la stabilisation, permet d'interpréter l'évolution du courant en terme de variations du travail de sortie ou de la surface émissive, dues par exemple à l'élimination progressive d'atomes adsorbés lors de l'émission (Schwoebel and Spindt, 1993).

Ces trois paramètres, le facteur de champ β , le travail de sortie Φ_s , et la surface émettrice Sp, sont les plus significatifs pour la description de l'émission. La distribution des facteurs de champ β



FIG. 3.7: Distribution des facteurs de champ des pointes d'une cathode déterminée par Constancias (1998).

des pointes est liée aux paramètres géométriques de celles-ci (Spindt et al., 1976): hauteur, rayon de courbure, orientation et distance grille-pointe. Elle a été déterminée pour les cathodes fabriquées par le LETI (Constancias, 1998). Cet auteur a montré que la distribution des facteurs de champ correspondait à une gaussienne dissymétrique (voir la Figure 3.7). Cette dissymétrie se traduit par une déplétion des faibles valeurs de β , et par un étirement vers les grandes valeurs, et témoigne du faible nombre de pointes qui participent effectivement à l'émission (TBC). Pour fixer les idées, sur quelques dizaines de micropointes analysées au microscope à force atomique, la dispersion observée des paramètres géométriques donne, d'après la modélisation adoptée dans Constancias (1998), une distribution avec une largeur à mi-hauteur égale à $2,3.10^7m^{-1}$ correspondant à une gamme de β s'étendant de $2,9.10^7m^{-1}$ à $5,2.10^7m^{-1}$. En prenant Vgp = 100V et $\Phi = 4,5eV$, on obtient dans cet intervalle une densité de courant J à température ambiante comprise entre $1,4.10^5A.m^{-2}$ et $2,2.10^{11}A.m^{-2}$, qui s'étale donc sur 6 ordres de grandeur !! Le courant émis par chaque pointe est donc compris entre $4, 4.10^{-11}A$ et $7.10^{-5}A$. On comprend donc bien que pour une cathode donnée, la dispersion des paramètres géométriques doit rester la plus faible possible. En réalité, la simplicité de la relation (3.9) ne peut s'accomoder que de conditions expérimentales idéales (vide parfait, pointes identiques, surfaces non polluées...) et en pratique la description physique de l'émission peut être améliorée en introduisant la notion de travaux de sortie et facteurs de champ *réels* ou *apparents* (voir par exemple Zhirnov et al. (2000)). Le travail de sortie *réel* correspond à la différence d'énergie entre le niveau de Fermi et le niveau du vide à sa surface (de l'ordre de 4.5eV pour le Molybdène). Le travail de sortie *apparent* est tiré de la pente de la droite de Fowler-Nordheim (établie à partir de données expérimentales), à partir de la relation :

$$\log \frac{I}{V^2} = \log a - \frac{b}{V} \tag{3.12}$$

dans laquelle b est lié à ϕ_s par la relation (3.11). En d'autres termes la relation (3.6) fait intervenir le travail de sortie *réel*, et le champ électrique de surface amplifié par l'effet de pointe $(F = \gamma F_0 = \beta_{reel} Vgp)$, alors que la relation (3.9) fait intervenir un champ électrique $(F = \beta_{apparent} Vgp)$ évalué à partir d'une valeur apparente du facteur de champ β , considéré comme constant sur toute la surface émissive (qui est la somme des surfaces des pointes qui émettent), et du travail de sortie *apparent* qui lui est lié, comme le montre la relation déduite de (3.9) et de (3.6):

$$\phi_{apparent} = \phi_{reel} \left(\frac{\beta_{apparent}}{\beta_{reel}}\right)^{2/3} \tag{3.13}$$

En outre la variation de la pente de la droite de FN observée pendant la période de formation des pointes, ou lors d'une phase de nettoyage (Schwoebel and Spindt, 1993), peut s'interpréter en termes d'évolution du travail de sortie, en considérant la relation suivante établie à β constant à partir des deux caractéristiques courant-tension d'une même cathode :

$$\phi_1 = \phi_2 \left(\frac{b_1}{b_2}\right)^{2/3} \tag{3.14}$$

Enfin l'élimination de β entre les relations (3.10) et (3.11) permet de relier la surface d'émission S au travail de sortie, soit :

$$S = 3,95 \times 10^3 \times \phi_{apparent}^{-2} \exp\left(-\frac{9.84}{\sqrt{\phi}_{apparent}}\right) \cdot a \times b^2$$
(3.15)

Brenac et al. (1987) remarquent que l'expression $\phi^2 \exp(-9.84\phi^{-1/2})$ reste proche de 2250 (à 15%) lorsque ϕ est compris entre 3 et 10 eV, ce qui permet d'obtenir une expression approchée de la surface émettrice de la cathode :

$$S = 4 \times 10^{-17} \cdot a \times b^2 \tag{3.16}$$

3.1.4 Distribution en énergie des électrons (cas d'une monopointe)

Young (1959) a utilisé le modèle de Fowler and Nordheim (1928) pour calculer la distribution

d'énergie des électrons émis par effet de champ, puis Young and Müller (1959) ont mesuré cette distribution grâce à un analyseur à potentiel retardateur, pour des électrons émis par une pointe extrêmement fine de tungstène. Une expression de cette distribution normalisée est (Gadzuk and Plummer, 1973):

$$\frac{dJ}{dE} \cdot \frac{1}{J_0} = \frac{\exp \epsilon/d}{d\left[1 + \exp \epsilon/k_B T\right]} \tag{3.17}$$

où J_0 est la densité de courant émise à température nulle (équation 3.6), et où $\epsilon = E - E_F$ représente la différence d'énergie des électrons émis par rapport à celle du niveau de Fermi de la pointe. A T = 0K la largeur à mi-hauteur de cette distribution est $\Delta E_0 = d \ln 2$. Le paramètre d vaut respectivement 0.087eV pour Vgp = 40V, et 0.219eV pour Vgp = 100V, ce qui entraîne pour $\phi_s = 4.5eV$ des dispersions en énergie théoriques de 0.06eV et 0.15eV. L'élargissement de la distribution avec la température est illustré par la Figure (3.8). Les valeurs de d pour différentes tensions d'extractions



FIG. 3.8: Distribution d'énergie théorique monopointe pour différentes valeurs de kT. 1)kT=0;2)kT=0,048d;3)kT=0,1d;4)kT=0,2d;5)kT=0,3d;6)kT=0,4d;7)kT=0,5d (Brenac et al., 1987).

donnent accès à la température critique, ou température d'inversion des émetteurs, définie comme la température d'apparition de l'effet Nottingham (voir par exemple Brenac et al. (1987)) : $Tc = \frac{d}{2k_B}$, soit Tc = 500K(40V) et Tc = 1270K(100V), ainsi qu'aux largeurs à mi-hauteur des distributions d'énergie des électrons émis pour ces températures : $\Delta E_c = 5.27k_BTc$, soit $\Delta E_c = 0.229$ eV et $\Delta E_c = 0.577$ eV, respectivement. Les largeurs à mi-hauteur des distributions à température ambiante sont comprises entre celles calculées à 0K et Tc. En outre, comme on l'a déjà évoqué, des facteurs environnementaux, comme par exemple l'adsorption d'atomes à la surface des pointes, peuvent influer sur la distribution d'énergie et modifier autant son allure que la position de son maximum. La modification locale du travail de sortie peut notamment provoquer un décalage en énergie de grande amplitude (une variation de 1.5eV a été observée dans le cas de l'oxygène par Spindt et al. (1976)).

3.1.5 Distribution angulaire

Les mesures de distribution angulaire des électrons réalisées sur des cathodes fabriquées par le LETI (Constancias et al., 1995; Purcell et al., 1997) montrent que le faisceau d'électrons est limité à

des cônes de demi-angles d'environ 30° à 40°. Jensen et al. (1996) ont proposé un modèle théorique axisymétrique dans lequel la partie émettrice de la pointe (correspondant à l'apex) est représentée par une sphère (Figure 3.9).

FIG. 3.9: Modèle pointe-grille adopté dans l'approche de Jensen et al. (1996).



Une grille d'extraction de forme toroïdale est située sur l'axe de symétrie, suivie d'une anode plane. Le calcul du potentiel $V(r, \theta)$, où r et θ sont respectivement la distance d'un point au centre de la sphère et la latitude, permet d'établir une forme paramétrique du champ électrique à la surface de la sphère :

$$F(\theta) = \frac{Ftip}{1 + \lambda(1 - \cos\theta)}$$
(3.18)

où Ftip représente le champ sur l'axe de symétrie et λ sa diminution le long de la surface de la sphère. Ces deux paramètres dépendent linéairement de la tension de grille (qui est la tension d'extraction dans ce système).



FIG. 3.10: Modélisation de la distribution angulaire de la densité de courant émise en considérant une dépendance du champ de surface donnée par la relation 3.18 (Phillips et al., 1996).

La variation avec l'angle d'émission de la densité de courant peut être calculée théoriquement grâce à cette approche (Phillips et al., 1996), comme le montre la Figure 3.11, où les courbes sont obtenues pour $\lambda = 0.32$. Une vérification expérimentale a été réalisée par ces mêmes auteurs.

Un second modèle a été développé par Zuber et al. (2002), dans lequel la pointe est représentée par un hyperboloïde de révolution dans un système de coordonnées sphéroïdales aplaties (cf. Figure ??). L'intérêt de cette approche est de fournir une description analytique du facteur de champ en fonction des paramètres géométriques du système pointe-grille : le rayon de courbure r, l'angle au sommet θ , et



FIG. 3.11: Géométrie de pointe dans le système de coordonnées sphéroïdales aplaties (Zuber et al., 2002).

la distance à la grille d. Si 2a représente la distance entre les foyers de l'hyperbole, on a les relations suivantes :

$$r = a\sin\theta\cos\theta$$
$$\cos\theta = \frac{d}{a}$$

et l'expression du facteur de champ $\beta = F/V$, établie par le calcul analytique du potentiel dans cette géométrie pointe-anode, est :

$$\beta(\xi) = \frac{1}{a\sin(\theta)Q_0(\cos\theta)\sqrt{\xi^2 - \cos^2\theta}}$$
(3.19)

 ξ représente l'abscisse curviligne du point d'émission comptée à partir du sommet de la pointe. $Q_0(\cos \theta)$ est un polynôme de Legendre de seconde espèce. Ces différents modèles permettent de construire un modèle numérique de l'émission, en considérant par ailleurs les répartitions statistiques des paramètres β et θ déterminés expérimentalement dans Constancias (1998).

3.1.6 Applications des cathodes à micro-pointes

Les deux principales applications visées par les cathodes à micropointes concernent les tubes hyperfréquences, et les écrans plats. Dans le premier domaine, l'utilisation de cathodes à micropointes offre un certain nombre d'avantages : augmentation de la bande passante, meilleure efficacité grâce à une forte densité d'électrons et la possibilité de modulation aux mêmes fréquences que l'onde radio, compacité du système, réduction de la consommation. Les plus gros efforts de développements ont cependant porté sur la mise au point des écrans plats, dont les débouchés commerciaux sont de loin les plus importants.

Dans le domaine spatial, quelques instruments récents ont fait appel aux cathodes à micro-pointes ou suscité des travaux préliminaires. On peut citer entre autres la propulsion électrique, qui nécessite un faisceau d'électrons neutralisateurs (Marrese et al., 2000), les "satellites en laisse" ou filins électrodynamiques (Morris et al., 2002), et le contrôle du potentiel des satellites. La charge utile de la sonde ROSETTA comprend une jauge de pression dans laquelle le filament chauffé classique a été remplacé par une cathode (Duvet, 2001; Jäckel et al., 2005). Les mesures obtenues pendant la phase de croisière montrent d'ailleurs un fonctionnement nominal de la jauge.

L'émergence rapide des nano-tubes de carbone au cours des dernières années et l'identification de champs d'application identiques à ceux des micropointes ont entraîné un fort investissement dans ce domaine. Ceci s'est traduit par un ralentissement des études et des développements des composants à micropointes de Molybdène. C'est la raison qui nous a poussés à compléter notre travail par une incursion rapide et très intéressante dans le domaine des cathodes à nano-tubes de carbone.

3.2 Les cathodes à nanotubes de carbone

Identifiés en 1991 par S. Iijima sous la forme d'un sous produit de synthèse des fullerènes (molécules polyèdriques C60), les nanotubes de carbones suscitent, en raison de leurs exceptionnelles propriétés physiques et chimiques, un intérêt grandissant. Les domaines d'applications sont très diversifiés, allant de la mécanique à la nanochimie, en passant par la nanoélectronique.

3.2.1 Description et procédés de fabrication



FIG. 3.12: Structure et dimensions typiques d'un nanotube de carbone. Les liaisons entre atomes de carbone forment des mailles hexagonales. Le rapport h/r de l'ordre 300 (soit environ 10 fois supérieur à celui des pointes) définit le facteur d'amplification du champ électrique, qui favorise l'émission par effet de champ des électrons.

Un nanotube de carbone est typiquement un cylindre de graphène (pavage de mailles hexagonales constituant une feuille de graphite) refermé sur lui même. Le fermeture est rendue possible par l'introduction de défauts topologiques (le défaut de base étant un pentagone) introduisant une courbure dans la structure. Sa longueur peut atteindre plusieurs microns alors que son diamètre varie de 1 à 10nm. Il existe principalement deux types de nanotubes : les nanotubes simple paroi, qui sont constitués d'une seule feuille refermée sur elle même, et les nanotubes multi-feuillets, qui sont constitués de cylindres emboîtés les uns dans les autres. Un effet structurel important pour les propriétés électroniques est associé à l'orientation des hexagones de la maille du tube. En effet le tube possède une chiralité spécifique, selon l'angle d'enroulement associé aux hexagones (angle entre l'axe du cylindre et une direction de référence qui s'appuie sur un côté d'un hexagone), ce qui se traduit par des propriétés conductrices, semi-conductrices, ou isolantes. Cette propriété géométrique ainsi que le comportement des couches électroniques, proche de celui des couches d'un métal, en fait un objet particulièrement intéressant pour l'émission de champ. Suivant le procédé de synthèse, deux modes d'auto-assemblage des tubes, exclusifs l'un de l'autre, se produisent. Dans le premier mode les tubes s'emboîtent les uns dans les autres et donnent naissance à des structures multi-feuillets. Dans le second mode, des tubes mono-feuillet s'assemblent en faisceau. Dans cette dernière structure les liaisons entre les atomes de carbone de chaque tube sont similaires à celles présentes entre les feuillets du graphite. Une description très générale de la structure et des propriétés des nanotubes de carbone peut être trouvée à l'adresse suivante : http://www.onera.fr/conferences/nanotubes.



FIG. 3.13: Typologie des nanotubes dans les cathodes développées par le CEA/LETI (photos de gauche) et Thales/TRT (photos de droite), et testées au laboratoire. Dans la structure du LETI, qui intègre une grille d'extraction, la croissance des tubes (réalisée par CVD) est non orientée, au contraire de la structure réalisée par Thales (par PECVD). (Crédits: CEA/LETI et LAAN/TRT)

Les cathodes à nanotubes que nous avons utilisées ont été développées par le CEA/LETI, et par le Laboratoire d'Analyse en Nanostructures de Thales Research and Technology (TRT). La Figure 3.13 présente des photos des différentes configurations. Dans le premier cas il s'agit de structures non orientées de type "fagots", dans le second cas de nanotubes dont la croissance est orientée perpendiculairement au substrat regroupés sous la forme de "bosquets", constitués chacun d'une dizaine de tubes voisins. TRT produit également, pour des applications spécifiques aux tubes hyperfréquences, et suivant une technologie similaire, des dispositifs constitués d'une "fôret" de tubes uniques régulièrement espacés. Cette configuration atteint une efficacité maximale, chaque tube pouvant émettre un courant environ 3 fois supérieur à celui d'un bosquet.

La croissance des tubes fabriqués par le LETI s'effectue par décomposition d'un gaz d'acétylène (C_2H_2) sur des plots de catalyseur (Nickel) inscrits dans rectangle de dimension $5 \times 10 \mu m$ et disposés sur un substrat en silicium (couche résistive), à basse température (de l'ordre de 500°C) (procédé CVD, Chemical Vapor Deposition). Ce mode de croissance procure aux tubes une orientation aléatoire. L'application du champ extracteur va provoquer un redressement d'un certain nombre de ces tubes, qui participent alors à l'émission. Un avantage de cette disposition est de permettre le remplacement des tubes éventuellement détériorés au cours de l'émission par des tubes inactifs jusque là. La Figure 3.13 montre l'alignement de 3 de ces unités au centre de grilles d'extraction, intégrées au composant à l'instar des cathodes à micropointes. La distance entre les centres des deux grilles encadrant un groupe étant d'environ 25 μm (Figure 3.14), la zone centrale des unités émissives est soumise à un champ plus faible que les bords. La juxtaposition d'un certain nombre de ces motifs permet de former des



FIG. 3.14: Vue schématique des couches de la cathode à nanotubes du LETI. Une couche de silice isole les grilles des contacts cathodiques. La couche ballast en silicium permet l'uniformisation de l'émission comme dans le cas des micropointes. (Crédits : CEA/LETI)

pixels d'environ $350\mu m$ de côté, comme dans le cas des cathodes à micropointes. Une surface de 1 cm^2 correspond à 1024 pixels répartis en 32 lignes et 32 colonnes. En raison d'un facteur d'amplification de champ très important (le rapport hauteur sur rayon est de l'ordre de 300) une tension d'extraction entre les grilles et les tubes d'environ 40 V suffit à provoquer l'émission. La structure de grille est beaucoup plus ouverte que dans le cas des pointes : les bords de grille sont à $5\mu m$ des bords de plots, alors que le sommet des tubes est à environ $0.7\mu m$ sous le plan de grille. L'une des conséquences de cette particularité géométrique est l'influence non négligeable du potentiel de l'anode (vers laquelle sont accélérés et collectés les électrons) sur le champ extracteur total, de l'ordre de $10V/\mu m$, auquel le potentiel d'anode contribue à hauteur de 10 à 30%.

La croissance des tubes produits par TRT est effectuée en phase vapeur, dans un mélange d'éthylène C_2H_2 et d'ammoniac NH₃, porté à une température d'environ 700°C, et partiellement ionisé grâce à l'imposition d'un champ électrique perpendiculaire au substrat. Il s'agit du procédé PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition).



FIG. 3.15: Etapes principales de la croissance des tubes réalisée par Thales. Le chauffage à 700° C permet la fragmentation du catalyseur. Le carbone provenant de la décomposition du gaz d'éthylène s'agrège sous les gouttes de Nickel repoussées au sommet des tubes. La croissance est perpendiculaire au substrat grâce à l'application d'un champ électrique. (Crédits: LAAN/TRT)

Le gaz se décompose et la structure graphitique croît sur des plots de catalyseur (gouttes de Ni) (Figure 3.15), dont la disposition et les dimensions sont parfaitement contrôlées par un procédé de lithographie à haute résolution par faisceau d'électrons. La présence du champ électrique perpendiculaire au substrat permet d'obtenir une croissance orientée suivant les lignes de champ, et de produire une répartition de tubes rectilignes dont on peut voir deux exemples sur la Figure 3.13. Dans un cas les tubes de 5 μm de hauteur sont espacés de 10 μm . Dans l'autre cas les tubes sont rassemblés par
paquets d'une dizaine d'éléments, comme dans le composant que nous avons essayé.

Dans ce dernier cas, la grille d'extraction n'est pas intégrée au composant, contrairement au dispositif du LETI. On utilise une grille maintenue à 100 μm des tubes et qui, pour des raisons de rigidité mécanique, possède une épaisseur de 100 μm et une transparence assez faible, de l'ordre de 10 %, en raison des mailles carrés de 20 μm au pas de 25 μm qui la constituent. La distance de 100 μm par rapport aux tubes nécessite alors d'appliquer une différence de potentiel d'environ 1000V pour initier l'émission. Dans le cas des composants du LETI cette tension seuil est environ 10 fois plus faible, pour une distance de séparation grille-tube inférieure d'un facteur 10 également.

Dans les structures proposées par les deux laboratoires les tubes sont du type multifeuillets, et leur diamètre est de l'ordre de 50nm.

3.2.2 Principe physique et fonctionnement des cathodes à nanotubes

Comme les micropointes, les nanotubes émettent les électrons par effet de champ (Jonge et al., 2004; Filip et al., 2001; Gröning et al., 2000). Les modèles théoriques de l'émission s'inspirent largement de la théorie de Fowler-Nordheim et aboutissent à des caractéristiques courant-tension pour un monotube proche d'une loi du type Fowler-Nordheim (Jonge et al., 2004), en faisant l'hypothèse d'une distribution des électrons semblable à celle d'un métal. Filip et al. (2001) ont montré que ce modèle est d'autant plus pertinent que le rayon du tube multifeuillets augmente. D'après ces auteurs l'émission se produit majoritairement dans le feuillet le plus externe. Le calcul de la densité d'électrons subissant l'effet tunnel nécessite la connaissance de la forme de la barrière de potentiel à l'interface avec le vide. Dans la mesure où la géométrie de l'extrémité des tubes est incertaine (fermée ou ouverte), l'approche standard consiste à faire l'hypothèse d'une barrière triangulaire comme dans le cas d'une interface métal-vide. Bien qu'adaptée à une surface métallique plane, cette approche est justifiée par le fait que vue par les électrons, la surface d'émission peut en général être considérée comme plane, sauf dans le cas de courbures extrêmes.

3.3 Montage et mise en œuvre des cathodes

3.3.1 Cathodes à micropointes

Le développement d'un dispositif de manipulation et de montage des cathodes à micropointes a constitué une étape délicate en raison du faible dégagement des pistes, de la fragilité mécanique des dépôts, des risques d'oxydation et de dépôt de poussières. L'utilisation de supports de type Pin-Grid-Array (PGA) employés en microélectronique est apparue comme une bonne solution pour sa relative rapidité de mise en œuvre et la facilité de manipulation qu'elle offre compte tenu des tests que nous souhaitions effectuer. Les composants sont collés au fond de la cavité du PGA à l'aide d'un ciment qualifié pour l'Ultra-Vide et étuvable jusqu'à 250°C. Les pistes sont ensuite reliées par une technique de "wedge bonding" aux connexions externes du PGA.

La Figure 3.16(b) illustre le résultat de cette opération délicate (les fils ont un diamètre de quelques dizaines de microns). La nécessité de minimiser les contaminations dues au dégazage des câbles dans



FIG. 3.16: (a) Cathode à micropointes montée en face avant du porte-échantillon. (b) Liaisons par "bonding" entre les pistes de la puce ($200\mu m$), et celles de la cavité du PGA.



FIG. 3.17: Ensemble de porte-échantillon utilisant une connectique mixte.

l'environnement proche du composant lors des phases d'étuvage nous a poussés à réaliser une connectique mixte composée de tiges conductrices dénudées au voisinage du boîtier PGA, suivie de faisceaux de conducteurs enrobés de kapton. La Figure 3.17 montre l'ensemble du montage et la Figure 3.16(a) une vue d'une cathode montée en face avant du porte-échantillon.

Pour assurer les meilleures performances en émission, la procédure de mise en route des cathodes à micropointes débute normalement par une période d'étuvage permettant d'éliminer l'eau adsorbée et les impuretés de surface. L'idéal est de procéder à des températures élevées (au moins $200\Sigma C$ pendant une dizaine d'heures, ou $450\Sigma C$ pendant 1h). L'émission est ensuite activée lentement par paliers successifs de la tension d'extraction. En l'absence de remise à l'air, il n'est en principe pas nécessaire de répéter la procédure de formation des cathodes. Dans le cas des expériences embarquées que nous projetons, il est évidemment difficile, voire impossible, d'appliquer cette procédure. C'est pourquoi nous avons pris le parti de tester les cathodes stockées préalablement sous atmosphère d'azote (pendant deux années), sans étuvage, en respectant une période de formation très lente. La Figure 3.18 montre l'évolution du courant émis par une cathode de 8 colonnes par 32 lignes (dont la structure est strictement identique à celle des cathodes de 32 colonnes par 32 lignes). La tension d'extraction passe progressivement de 20V à 80V, en environ 10 heures, puis la tension est poussée à 85V. On observe une stabilisation relative du courant après environ 30 heures d'émission à cette tension, avec une augmentation du courant crête de $510\mu A$ à $870\mu A$, suivie d'une zone de stabilité où le courant décroît très lentement. Le détail de la zone de stabilité de la figure 3.19 montre que la lente diminution du courant se fait par petits sauts de l'ordre de $1\mu A$ entre des palliers très stables (variation < $0.5\mu A$).

FIG. 3.18: Stabilisation du courant d'une cathode de 8 colonnes par 32 lignes (256 pixels). La tension d'extraction passe de 0 à 85V en une dizaine d'heures, puis le pallier atteint est suivi pendant 30 heures environ. La pression moyenne pendant cette mesure est de l'ordre de 1.7×10^{-7} mbar.



<u>10⁻³</u> 0.9 0.8 0.7 € ^{0.6} lcrête 0.5 0.4 0.3 0.2 0.1 1000 2000 3000 4000 5000 Temps (min)

FIG. 3.19: Zoom sur courbe de la Figure 3.18 montrant le saut entre deux palliers. Le courant décroît par palliers très stables, d'une durée moyenne de 200 minutes.

Le composant testé ici fournit donc un courant crête de $870\mu A$ à 85 V, ce qui, ramené à une structure à 32 colonnes, correspond à un courant de l'ordre de 3,5mA. Pour cette valeur de la tension d'extraction, les performances annoncées des cathodes du LETI sont de l'ordre de 6mA. Les performances obtenues malgré l'absence d'étuvage restent donc satisfaisantes. Nous avons noté que l'inactivation totale de la cathode pendant une semaine n'entraîne pas de diminution sensible du niveau de courant maximum atteint à 85V.

3.3.2 Cathodes à nanotubes de carbone

L'intégration de cathodes à nanotubes dans notre dispositif a demandé la réalisation de deux supports adaptés à chacun des cas (Figure 3.20) et compatibles avec notre porte échantillon.

Un des avantages des cathodes à nanotubes de carbone sur les cathodes à micropointes est leur



FIG. 3.20: Vue des supports de cathodes réalisés pour chaque type d'émetteur testé au CETP. Le maintien de la cathode du LETI (photo de gauche) est assuré par pression mécanique (qui permet également le contact électrique). Dans le cas de Thales seule l'ouverture de grille est visible. Le composant glissé dans un rail est plaqué par un ressort contre une cale en silice le séparant de la grille d'extraction.

moindre sensibilité à l'oxydation lors du stockage, et la plus grande facilité de manipulation qu'elles offrent. Leur activation est également plus rapide, ne nécessitant pas de phase d'étuvage, et la période de rodage, toujours obligatoire, s'effectue par paliers de tension beaucoup plus courts, avec une vitesse de variation du potentiel de l'ordre de $1V.s^{-1}$ contre $1V.min^{-1}$ dans le cas des micropointes non étuvées.



FIG. 3.21: Configuration de l'émission et raccordement des potentiels d'alimentation et des mesures de courants. Dans les deux cas la grille d'extraction du composant est placée à 5mm de l'anode collectrice (diaphragme d'entrée de l'analyseur). Pour le dispositif de LETI les contacts cathodiques sont maintenus à la masse, les grilles d'extraction entre 20 et 100V (en régime continu ou pulsé), le diaphragme étant polarisé à 180V. Pour le dispositif de Thales les tubes sont maintenus à la masse, le potentiel de la grille d'extraction (continu) variant entre 0 et 2000V. Le diaphragme est polarisé à 2000V.

Nous avons opté pour une connectique facilitant la mise en œuvre des cathodes, dans laquelle un seul potentiel alimente toutes les grilles d'extraction, et un autre potentiel unique alimente les contacts cathodiques (dans le cas de l'échantillon du LETI les 32 contacts de grille et les 32 contacts cathodiques sont court-circuités). Un schéma de la configuration des potentiels adoptée dans chaque cas est représenté sur la Figure 3.21.

1. Echantillon LETI: La mise en œuvre de cette cathode, théoriquement identique à celle des cathodes à micropointes, et grandement simplifiée pour ce test étant donné l'adaptation nécessaire du porte échantillon qui interdit l'indexation des 64 pistes de la matrice. Ainsi la polarisation d'un seul contact pour les grilles et d'un seul contact pour toute les cathodes est employée. Les résultats des tests sont présentés dans la section 5.2. Dans ce cas, les difficultés rencontrées ne nous ont pas permies de suivre l'évolution de courant émis sur une durée significative, de l'ordre de plusieurs dizaines d'heures.

2. Echantillon TRT:

Contrairement aux cathodes développées par le LETI, la structure de cette cathode n'est pas intégrée. Comme on l'a déjà évoqué la grille d'extraction étant maintenue à l'aide d'une entretoise en silice à une distance de $100\mu m$ des tubes. Son potentiel doit alors être porté à environ 1000V pour initier l'émission. Ce montage présente l'avantage de permettre un fonctionnement du composant en continu, puisqu'il n'y a d'une part pas de risque de court-circuit entre la grille et les tubes, et d'autre part peu de risques d'accumulation de charges dans la résistance d'isolement entre le substrat et la grilles car elle est en contact avec l'électrode de grille sur toute sa surface, et car de plus le faisceau émis, fortement focalisé, est restreint à une surface centrée et faible par rapport au diamètre de l'ouverture dans la silice isolante. Le montage est également simple : l'anode collectrice est polarisé à 2000V, les tubes étant connectés à la masse, et la grille d'extraction est reliée à un générateur de tension variable entre 0 et 2000V. En raison de la



FIG. 3.22: Evolution du courant émis en continu pendant 60h pour Vgc=1450V. Les fluctuations du courant mesuré sont de l'ordre de 10%.

très faible transparence de la grille d'extraction le courant reçu par le diaphragme est de l'ordre de 10% du courant émis. Celui-ci atteint environ 1mA à 2000V, pour une surface émissive de $0.5 \times 0.5 mm^2$ (soit une densité de $400 mA.cm^{-2}$). Le fonctionnement de cet échantillon étant

nominal, nous avons pu suivre l'évolution du courant émis sur une durée de 60h (Figure 3.22), pendant laquelle les variations enregistrées pour Vgc=1450V ont été inférieures à 10% de la valeur moyenne du courant émis $(83\mu A)$.

.BIBLIOGRAPHIE

- Balsiger, H., K. Altwegg, E. Arijs, J.-L. Bertaux, J.-J. Berthelier, P. Bochsler, G. R. Carignan, P. Eberhardt, L. A. Fisk, S. A. Fuselier, and 18 co-authors, 1998: Rosetta orbiter spectrometer for ion and neutral analysis-rosina. *Advances in Space Research*, 21, 1527–1535.
- Baptist, R., L. Bachelet, and C. Constancias, 1997: Microtips and resistive sheet: A theoritical description of the emissive properties of the system. J. Vac. Sci. Techno. B, 15(2).
- Barat, M., J. C. Brenot, J. Fayeton, and Y. Picard, 2000: Absolute detection efficiency of a microchannel plate detector for neutral atoms. *Review of Scientific Instruments*, **71**, 2050–2052.
- Brenac, A., R. Baptist, G. Chauvet, and R. Meyer, 1987: Caractéristiques énergétiques de cathodes à micropointes à émission de champ. *Revue Phys. Appl.*, **22**, 1819–1834.
- Constancias, C., 1998: Emission d'Electrons à partir de Micropointes pour Ecrans Plats: Simulation, Caractérisation et Confrontations Experimentales. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier.
- Constancias, C., D. Hervé, R. Accomo, and E. Molva, 1995: Investigation of an electron-beam microgun using a microtip array. J. Vac. Sci. Techno. B, 13(2), 611–615.
- Duvet, L., 2001: Instrumentation pour l'Etude In Situ des Atmosphères Neutres et Ionisées Planétaires et Cométaires. Thèse de doctorat, Université Paris VI.
- Filip, V., D. Nicolaescu, and F. Okuyama, 2001: Modeling of the electron field emission from carbon nanotubes. J. Vac. Sci. Techno. B, 19(3), 1016–1022.
- Fowler, R. H. and L. Nordheim, 1928: . Proc. Roy. Soc. London, A119(173).
- Gadzuk, J. W. and E. W. Plummer, 1973: Field Emission Energy Distribution. *Reviews of Modern Physics*, **45**(3), 487–548.
- Good, R. H. and E. Müller, 1956: Field Emission. Handbuch der Physik, Bd. 21.
- Gröning, O., O. M. Küttel, C. Emmenegger, P. Gröning, and L. Schlapbach, 2000: Field emission properties of carbon nanotubes. *J. Vac. Sci. Techno. B*, **18**(2), 665–678.

- Helbing, R. K. B., Y. F. Hsieh, and V. Pol, 1975: Stimulated surface ionization: A new effect. The Journal of Chemical Physics, 63, 5058.
- Jäckel, A., K. Altwegg, P. Wurz, H. Balsiger, E. Arijs, J. J. Berthelier, S. Fuselier, F. Gliem, T. Gombosi, A. Korth, and H. Rème, 2005: ROSINA'S First Measurements from Space and Anticipated Analyses at Comet Churyumov-Gerasimenko. *LPI Contributions*, **1280**, 75.
- Jensen, K. L., E. G. Zaidman, M. A. Kodis, B. Golpen, and D. N. Smithe, 1996: Analytical and seminumerical models for gated field emitter arrays. I Theory. J. Vac. Sci. Techno. B, 14(3), 1942– 1946.
- Jonge, N., M. Allioux, M. Doytcheva, M. Kaiser, K. B. K. Teo, R. G. Lacerda, and W. I. Milne, 2004: Characterization of the field emission properties of individual thin carbon nanotubes. *Appl. Phys. Lett.*, 85(9), 1607–1609.
- Kittel, C., 1983: Physique de l'état solide. Dunod Université, 5ème ed.
- Marrese, C. M., J. E. Polk, and J. Mueller, 2000: Field Emitter Cathodes and Electric Propulsion Systems. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **621**.
- Morris, D., B. Gilchrist, and A. Gallimore, 2002: Integration of Field Emitter Arrays into Spacecraft Systems. *Space Technology and Applications International Forum* 393–400.
- Phillips, P. M., C. Hor, L. Malsawma, K. L. Jensen, and E. G. Zaidman, 1996: Design and construction of apparatus for characterization of gated field emitter array electron emission. *Rev. Sci. Instrum.*, 67(6), 2387–2396.
- Purcell, S. T., Vu Thien Binh, and R. Baptist, 1997: Nanoprotrusion model for field emission from integrated microtips. J. Vac. Sci. Techno. B, 15(5), 1666–1677.
- Schwoebel, P. R. and C. A. Spindt, 1993: Field-emitter array performance enhancement using hydrigen glow discharges. *Appl. Phys. Lett.*, **63**(1), 33–35.
- Spindt, C. A., 1968: A Thin-Film Field-Emission Cathode. J. Appl. Phys., 39, 3504–3505.
- Spindt, C. A., I. Brodie, L. Humphrey, and E. R. Westerberg, 1976: Physical properties of thin-film field emission cathodes with molybdenum cones. J. Appl. Phys., 47(12), 5248–5263.
- Wang, F. F. Y., 1980: Introduction to Solid State Electronics. North-Holland Publishing Company, New-York.
- Young, R. D., 1959: Theoritical Total-Energy Distribution of Field-Emitted Electrons. *Phys. Rev.*, 113(1), 110–114.
- Young, R. D. and E. W. Müller, 1959: Experimental Measurement of the Total-Energy Distribution of Field-Emitted Electrons. *Phys. Rev.*, **113**(1), 115–120.

- Zhirnov, V. V., C. Lizzul-Rinne, G. J. Wojak, R. C. Sanwald, and J. J. Hren, 2000: Standardization of field emission measurements. *J. Vac. Sci. Techno. B*, **19**(1), 87–93.
- Zuber, J. D., K. L. Jensen, and T. E. Sullivan, 2002: An analytical solution for microtip field emission current and effective emission area. J. Appl. Phys, 91(11), 9379–9384.

CHAPITRE 4

Dispositif expérimental pour la caractérisation des cathodes

La conception de sources d'ionisation à impact électronique et l'optimisation de leur fonctionnement demandent une connaissance précise des distributions angulaires et énergétiques des électrons ionisants issus de la source d'électrons. Dans le but de déterminer ces caractéristiques nous avons conçu et réalisé un dispositif expérimental dont la description et la modélisation sont l'objet de ce chapitre.

4.1 Principe de la mesure

Notre objectif était de déterminer les caractéristiques du faisceau émis par les pixels des cathodes à micropointes. Pour cela il a été nécessaire de mesurer le courant total émis, ainsi que la distribution en énergie et en angle des électrons. Mesurer une distribution en énergie peut se faire soit par une méthode différentielle (on mesure le flux d'électrons dans une bande d'énergie ΔE que l'on déplace entre 0 et l'énergie maximum E_{max}) soit par une méthode intégrale (on mesure le flux des électrons d'énergie supérieure à E_0 , E_0 variant de 0 à E_{max}). La première méthode fournit avec une meilleure précision la structure fine du spectre en énergie et permet, par exemple, de mettre en évidence l'existence de plusieurs pics, information utile lorsqu'on s'intéresse à la physique détaillée des processus d'émission (voir par exemple Purcell et al. (1997)). Cependant, les champs de vue instantanés des spectromètres à électrons qui permettent d'effectuer des mesures de ce type sont en général restreints, de l'ordre de 10Σ . Pour obtenir la distribution en énergie à différents angles d'émission, il est nécessaire de positionner l'axe de visée de l'analyseur dans un grand nombre de directions par rapport au pixel étudié, ce qui implique l'utilisation d'un système de rotation en azimuth sur 360Σ et en élévation sur environ 75Σ , centré sur le plan des grilles de la cathode. Ces contraintes correspondent à une mécanique complexe à réaliser et à mettre en œuvre sous vide. Il faut aussi, bien entendu, déplacer la cathode parallèlement à son plan suivant 2 axes orthogonaux pour amener les différents pixels sur le centre du dispositif de rotation.

Pour simplifier le dispositif de mesure, nous avons donc préféré la seconde méthode, en analysant les électrons émis au moyen d'un analyseur à potentiel retardateur hémisphérique dont le principe est indiqué sur la Figure 4.1.



FIG. 4.1: Principe de l'analyseur d'énergie hémisphérique à potentiel retardateur. L'espace entre la plaque d'entrée de l'analyseur (appelée le diaphragme, polarisé au potentiel Vd) et les grilles d'extraction de la cathode (au potentiel Vg) est équipotentiel. Le champ radial retardateur \mathbf{F} est centré sur l'entrée de l'analyseur, dont le collecteur est porté au potentiel V_{coll} . Les électrons émis au potentiel des cathodes V_{cath} , sont collectés lorsque leur énergie cinétique $E = e(V_{coll} - V_{cath})$ au niveau du collecteur est supérieure au travail de sortie Φ_{coll} de ce dernier.

Le collecteur hémisphérique (C) est polarisé à un potentiel variable V_{coll} , et, grâce à un ensemble d'électrodes tracées sur la face interne de la plaque d'entrée de l'analyseur, on maintient un potentiel à géométrie sphérique à l'intérieur de l'espace d'analyse (voir plus de détails au paragraphe 4.2.1). Les électrons émis au potentiel des cathodes (pointes ou tubes) V_{cath} pénètrent dans l'espace d'analyse par un trou situé au centre O de (C) et ont des trajectoires radiales. Si $E = e(V_{coll} - V_{cath})$ est leur énergie cinétique à l'arrivée sur la surface du collecteur, dont le travail de sortie est Φ_{coll} , ils sont collectés lorsque $E > \Phi_{coll}$, et repoussés dans le cas contraire.

La variation du potentiel du collecteur permet ainsi de mesurer la variation $I(V_{coll})$ du courant d'électrons et fournit, par dérivation, le spectre en énergie. En déplaçant la cathode dans son plan, suivant les 2 axes X et Y, on fait varier la direction (PO), ce qui permet d'accéder à la distribution angulaire. Le dispositif de mesure ne nécessite donc que le déplacement selon X et Y de la cathode, ce qui réduit considérablement sa complexité et la durée des séquences de mesure.

4.2 Descripiton du dispositif de mesure

Le dispositif de mesure est conçu autour de l'analyseur en énergie et du mouvement XY qui permet de déplacer la cathode. L'ensemble est installé dans une enceinte à vide où un pompage turbomoléculaire permet d'atteindre un vide de l'ordre de 10^{-8} mbar.

L'enceinte peut être étuvée à une température maximale de $150\Sigma C$, soit à l'aide de bandes chauffantes situées à l'extérieur, soit à l'aide d'une lampe halogène interne qui permet de chauffer plus spécifiquement les cathodes. Le spectre typique des gaz résiduels est indiqué sur la Figure 5.2 du chapitre suivant.



FIG. 4.3: Coupe de l'ensemble du dispositif expérimental.

La Figure 4.2 représente une vue extérieure de l'enceinte de test, la Figure 4.3 une coupe du dispositif dans un plan vertical, et la Figure 4.4 une vue éclatée. Un bras porte échantillon solidaire d'un mouvement XY commandé de l'extérieur permet le déplacement de la cathode parallèlement au plan d'entrée de l'analyseur en énergie. L'électronique de mesure et de commande est située à l'extérieur de l'enceinte à vide et commandée à partir d'un PC.

Comme nous l'avons indiqué dans le premier paragraphe, l'analyse en énergie et la détermination de la distribution angulaire des électrons ont été réalisées en utilisant un analyseur à potentiel retardateur hémisphérique. Un certain nombre d'auteurs ont utilisé cette méthode dans le passé (Henderson and Badgley, 1931; Young and Müller, 1959) qui a aussi inspiré des développements commerciaux plus récents (voir par exemple McCarson et al. (1998)). La Figure 4.5 illustre le fonctionnement de l'analyseur hémisphérique, à partir du diagramme d'énergie potentielle des électrons dans le cas où ceux-ci sont accélérés vers le collecteur.

Les électrons émis sont extraits de la bande de conduction du métal porté au potentiel Vpointes.



FIG. 4.4: Vue éclatée de l'expérience. La cathode à micropointes est insérée dans la cavité d'un support PGA (Figure 3.4) enfiché dans une céramique qui fait également office de connecteur intermédiaire avant la bride de sortie. Les anneaux métallisés de l'analyseur hémisphérique faisant face au collecteur hémisphérique sont visibles sur la figure. Une coupe de la cavité hémisphérique de l'analyseur en énergie est donnée sur la Figure 4.7).



FIG. 4.5: Diagramme d'énergie potentielle des électrons accélérés vers le collecteur. E_{Fx} et Φ_x représentent respectivement le niveau de Fermi et le travail de sortie du conducteur x. $J(E-E_{Fp})$ représente la distribution du courant en fonction de $E_0 = E - E_{Fp}$, la différence entre l'énergie de l'électron et celle du niveau de Fermi de l'émetteur.

Comme on l'a vu au paragraphe 3.1.2, ils proviennent de niveaux d'énergie proches du niveau de Fermi, dont l'énergie potentielle E_{Fp} sur le diagramme de la Figure 4.5 est -eVpointes. Si E_{Fg} désigne le niveau de Fermi de la grille, et Vg le potentiel de grille, on peut alors écrire :

$$E_{Fp} - E_{Fg} = e(Vg - Vpointes) \tag{4.1}$$

On note E_0 la différence entre l'énergie initiale des électrons dans le métal, et l'énergie du niveau de Fermi E_{Fp} . E_0 est négative si les électrons proviennent de niveaux inférieurs au niveau de Fermi, et positive dans le cas contraire. A température non nulle, les électrons émis provenant des couches profondes de la bande de conduction possèdent une énergie plus grande que ceux provenant des couches les plus externes. Ces électrons sont accélérés par les grilles, puis traversent l'espace équipotentiel entre les grilles et le diaphragme d'entrée de l'analyseur, et pénètrent dans l'analyseur où règne le champ électrique radial retardateur. Pour illustrer simplement le principe de l'analyse en énergie, on suppose pour simplifier que les pointes sont polarisées aux mêmes potentiels que les contacts cathodiques. En réalité, on verra au chapitre 5 de cette partie que plusieurs effets se conjuguent pour que le potentiel des pointes soit différents du potentiel des contacts cathodiques.

Supposons dans un premier temps que l'énergie relative E_0 des électrons par rapport au niveau de Fermi est nulle. Les électrons sortant de la pointe sont accélérés vers la grille, portée au potentiel Vg. L'énergie potentielle d'un électron dans le vide au voisinage de la grille est $E_{Fg} + \Phi_{grille}$, où Φ_{grille} est le travail de sortie du matériau de grille. Leur énergie cinétique au voisinage de la grille peut donc s'écrire $e(Vg - Vpointes) - \Phi_{grille}$, comme indiqué sur la Figure 4.5. Au voisinage de la surface du collecteur, leur énergie cinétique est $e(Vcollecteur - Vpointes) - \Phi_{coll}$. Les électrons sont collectés par le collecteur si cette énergie cinétique est positive, dans le cas contraire, ils sont repoussés. La condition de collection est donc:

$$e(V collecteur - V pointes) > \Phi_{coll} \tag{4.2}$$

Supposons maintenant E_0 non nulle. Dans ce cas, l'énergie cinétique des électrons au voisinage de la grille est $e(Vg - Vpointes) - E_0 - \Phi_{grille}$, et la condition de collection devient :

$$e(V collecteur - V pointes) - E_0 > \Phi_{coll}$$

$$\tag{4.3}$$

La condition de coupure correspond donc au cas où l'écart eV de la Figure 4.5 est réduit à 0. En pratique, l'analyse par potentiel retardateur s'effectue donc en faisant varier la différence de potentiel (Vcollecteur - Vpointes). Comme la tension d'extraction des électrons, et donc Vpointes, sont fixées au cours de l'expérience, seul Vcollecteur varie en pratique, dans le sens d'une diminution progressive de l'écart eV. A l'instant initial, la différence (Vcollecteur-Vpointes) est suffisamment grande pour collecter tous les électrons de la distribution, et le courant collecté I_c est donc maximal. La diminution de (Vcollecteur-Vpointes), et donc la diminution de l'écart eV, a pour effet de repousser progressivement les électrons de plus en plus énergétiques, et d'entraîner une diminution du courant collecté jusqu'à la condition de coupure. La différence de potentiel ΔV_{coll} entre $I_c = 0$ et $I_c = I_{cmax}$ permet alors de

remonter à la distribution en énergie des électrons émis.

Le travail de sortie d'un métal est une grandeur locale dépendant de sa composition chimique, de son orientation cristalline, et de son état de surface. La détermination expérimentale de ϕ_{coll} dans les conditions d'expérience est nécessaire lorsque l'on souhaite déterminer avec une précision meilleure que 0,5eV la position du maximum de la distribution émise. Sa valeur exacte peut être mesurée par exemple par une méthode de spectroscopie aux rayons X (comme par exemple dans Schlesser (1997)). Toutefois notre objectif n'est pas d'atteindre une telle précision, puisque les zones de maximum des sections efficaces d'ionisation présentent en général des largeurs de quelques volts. C'est pourquoi dans notre cas une valeur approchée de 4.85 eV ($\pm \Delta \Phi_{coll} = 0.5 eV$), issue des données de la littérature, a été adoptée pour le collecteur en acier inox (cf. Benenson et al. (2002)). Les caractéristiques de l'état de surface du collecteur doivent rester constantes au cours d'une telle mesure, mais en pratique elles sont difficiles à contrôler, en particulier lorsque le courant collecté est suffisamment fort pour modifier la couche de gaz adsorbé. L'incertitude associée à la mesure en énergie doit donc être prise en compte, même si elle est difficile à évaluer en l'absence de publications fournissant les variations du travail de sortie en fonction de l'état de surface, et en outre car l'état de surface du collecteur est difficilement observable au cours de l'expérience.

4.2.1 Analyseur en énergie



FIG. 4.6: Détail de l'entrée de l'analyseur à potentiel retardateur (les proportions ne sont pas respectées). Le trou est recouvert d'une métallisation permettant de porter le premier anneau au potentiel du diaphragme. L'ensemble des 18 anneaux (dont les 3 premiers sont représentés) associé à l'hémisphère collecteur permet d'imposer des équipotentielles hémisphériques centrées sur l'entrée de l'espace d'analyse. Le champ de vue instantané α de l'analyseur est de 120 Σ .

L'analyseur en énergie hémisphérique est représenté sur la Figure 4.7(a). Le plan d'entrée (dénoté diaphragme) est un clinquant en molybdène d'épaisseur 50 μm percé d'un trou central de diamètre 250 μm . Sur la face interne de ce clinquant se trouve une céramique d'épaisseur 250 μm percée d'un trou de diamètre 2mm. Comme indiqué sur la Figure 4.6, le trou de la céramique est métallisé, la métallisation s'étendant sur un anneau de 0.66mm de largeur sur la face interne de la céramique. La métallisation est portée au potentiel du diaphragme. Cette géométrie permet d'avoir un champ de vue global de 120 Σ pour l'analyseur, et d'éviter toute perturbation non contrôlée des trajectoires des électrons, puisqu'on est assuré qu'il n'y a aucune surface isolante en vue directe des électrons incidents. Sur la céramique, 18 équipotentielles sont matérialisées, sous la forme d'anneaux de largeur 1 mm et distants de 200 μm , l'anneau extérieur étant au voisinage immédiat du collecteur. En polarisant convenablement l'ensemble de ces anneaux entre le potentiel du collecteur (anneau externe) et le potentiel du diaphragme (anneau interne) on impose dans l'espace d'analyse un potentiel à géométrie sphérique variant en $\frac{1}{r}$. Le champ électrique retardateur est ainsi radial, et les propriétés de l'analyseur pour l'analyse en énergie des électrons sont en pratique identiques quelque soit la direction d'arrivée de ceux-ci.

On remarquera, sur le collecteur, dans l'axe de l'analyseur, la présence d'une électrode (dénommée pupille sur la Figure 4.7(a)) dont la surface est d'environ 1 mm², isolée de la partie principale du collecteur (mais toujours polarisée au même potentiel). Cette électrode permet d'améliorer la précision des mesures de distribution angulaire et, en particulier, de rechercher plus aisément la direction du maximum d'émission d'un pixel.

Enfin, il faut signaler qu'au cours de la phase initiale de ce travail, nous avons également utilisé un analyseur d'énergie simplifié qui est représenté sur la Figure 4.7(b). Il s'agit d'un analyseur plan à potentiel retardateur, qui fonctionne suivant un principe identique à celui de l'analyseur sphérique, mais dont le champ de vue est limité.

Le diaphragme d'entrée de l'analyseur plan est comme celui de l'analyseur sphérique un clinquant en Molybdène de 50 μm d'épaisseur, percé d'un trou central de 250 μm de diamètre. Une première grille (maille de 500 μ m, largeur des barreaux 30 μ m, sur un diamètre de 4mm), placée à 1.75mm du plan d'entrée, est polarisée au même potentiel que le diaphragme, pour éviter les perturbations des trajectoires à l'entrée de l'analyseur. Une seconde grille placée à 1.2mm de la première et polarisée au potentiel $V_{retardateur}$ constitue l'électrode retardatrice. Le collecteur, placé à 0.7mm de la grille retardatrice, est un tube de 4 mm de diamètre et de 18mm de profondeur, dont la paroi interne est striée pour que l'émission secondaire par les parois soit très faible et ne perturbe pas de façon significative les mesures. Pour la même raison le potentiel du collecteur est fixé à $V_{ret} + 28V$, de manière à piéger les électrons secondaires. La transparence de chaque grille étant de l'ordre de 80% le facteur de transmission global est de l'ordre de 64%.



(a) Analyseur sphérique

(b) Analyseur plan

FIG. 4.7: (a) Coupe de la cavité hémisphérique de l'analyseur. Les anneaux métallisés (largeur 1mm) sont espacés de 200µm. Le rayon du collecteur est de 22mm. (b) Coupe de l'analyseur plan.

L'ensemble de l'électronique de mesure et le système de commande et d'acquisition sont décrits dans l'annexe 7.4.4.

4.3 Analyseurs en énergie : modélisation et calcul des performances.

4.3.1 Modèle numérique 2D, résolution en énergie et fonction de transfert

Un modèle numérique a été développé pour chacun des analyseurs à l'aide du logiciel de simulation électrostatique SIMION 7.0. Les deux analyseurs ont une symétrie cylindrique autour de l'axe principal X. La cathode et le blindage entre la cathode et le diaphragme d'entrée de l'analyseur ont en revanche une géométrie 3D (voir Figure 4.7(a)). Dans un premier temps un modèle cylindrique 2D a été utilisé, y compris pour l'espace situé entre la cathode et le diaphragme.

Dans les deux cas une maille de $10\mu m$ a été choisie, permettant d'assurer une représentation réaliste du gradient de potentiel à proximité du diaphragme d'entrée, dont l'épaisseur est de $50\mu m$. La Figure 4.8 montre la configuration des électrodes modélisées dans chaque cas.

La simplicité de la géométrie des deux analyseurs permet de valider leur modèle numérique par une approche analytique simple, que nous présentons maintenant.



FIG. 4.8: Modèles électrostatiques des analyseurs dans SIMION 3D (plan X-Y). (a) Analyseur hémisphérique. (b) Analyseur plan. L'axe de symétrie est (Ox). La surface émettrice est centrée sur (Ox), au niveau de la grille d'extraction.

Analyseur plan: En ce qui concerne l'analyseur plan, et dans le cas d'une source ponctuelle, la première cause de dégradation de la résolution en énergie provient de la divergence du faisceau. Si θ est le demi angle du faisceau, le rapport entre les composantes transverse et radiale des vitesses est $tan^2\theta$, et l'aberration correspondante s'écrit $\frac{\Delta E}{E} = \sin^2\theta$. Pour un faisceau monocinétique d'énergie égale à 80eV, et dispersé de $\pm 10\Sigma$ en angle, cette relation donne $\frac{\Delta E}{E} = 0.03$. La simulation numérique de l'analyseur donne un résultat $\frac{\Delta E}{E} = 0.032$ en bon accord (Figure 4.9(c)). La différence entre les champs électriques de part et d'autre du diaphragme entraîne une déformation des équipotentielles sous la forme de bulles et donne un effet de lentille qui peut être évalué. Si f est la distance focale et d la distance entre le diaphragme et le collecteur on peut montrer que $\frac{1}{f} = -\frac{1}{4d}$, à la condition de coupure. L'aberration en énergie due au diamètre non nul du diaphragme (r_0) peut alors s'écrire: $\frac{\Delta E}{E} = \sin^2 \frac{r_0}{4d}$ pour un faisceau de diamètre supérieur ou égal à celui de l'ouverture. L'aberration correspondante, $\Delta E = 23 meV$ à 80eV, n'entraîne pas de dégradation significative de la mesure dans notre cas de figure. En configuration nominale une surface émettrice équivalente à celle d'un pixel (soit $0.1225mm^2$) est positionnée sur l'axe de l'analyseur face au diaphragme. La simulation de cette configuration (Figure 4.9(a)), employant un faisceau monocinétique de 80 eV, de demi-angle $\theta = 30\Sigma$, l'angle solide moyen du sous faisceau pénétrant l'analyseur étant de l'ordre de 2.5°, montre que $\frac{\Delta E}{E} < 0.005$, soit une dispersion de 400meV à 80eV. Suivant Simpson (1961), l'erreur sur l'énergie dans le cas d'un analyseur plan, lorsqu'une source ponctuelle est située à une distance p du diaphragme, éloigné du collecteur d'une distance d, s'écrit, pour des trajectoires paraxiales :

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{r_0^2}{16d^2} \frac{(p+4d)^2}{p^2} \tag{4.4}$$



FIG. 4.9: (a) Simulation d'une surface émettrice équivalente à celle d'un pixel centré sur l'axe de symétrie. (b) Simulation d'une pupille émettrice de 5 mm de diamètre dans l'analyseur plan. Seules les trajectoires centrées sur le trou et d'angle inférieur ou égal à 30Σ sont considérées. On distingue clairement l'effet divergent au passage de la grille retardatrice. Les potentiels sont Vg = Vd = 80V, Vret =30V, Vcoll = 58V. Le collecteur (tube de 18 mm de long) est coupé sur la figure. (c) Réponse de l'analyseur à un faisceau monocinétique centré sur l'entrée.

Dans nos conditions telles que p = 5mm et d = 3.65mm, on obtient $\frac{\Delta E}{E} = 4.7 \times 10^{-3}$, soit 376meV à 80V, ce qui est cohérent avec le résultat de simulation. L'effet des grilles sur la résolution (dont le modèle 2D ne tient pas compte) est négligeable. En effet celui-ci peut être évalué analytiquement, moyennant quelques hypothèses simplificatrices. Pour ce faire nous reprenons les grandes lignes de l'analyse menée dans Bergmann et al. (1989), pour des grilles 1D constituées de fils parallèles. Le potentiel électrostatique 2D U(x, y) au voisinage d'une grille de pas a (d'étendue infinie suivant z) frontière entre deux domaines de champs électriques E_1 et E_2 (Figure 4.10), s'écrit :

$$U(x,y) = \frac{x(E_2 - E_1)}{2} + \frac{(E_2 - E_1)a}{4\pi} ln \left[sinh^2(\frac{\pi x}{a}) + sin(\frac{\pi y}{a}) \right]$$
(4.5)



FIG. 4.10: Déviation de trajectoires par effet de "micro-lentille" électrostatique.

L'expression de la composante suivant y du champ électrique qui s'en déduit est :

$$E_y(x,y) = -\frac{d}{dy}U(x,y) = -\frac{(E_2 - E_1)}{2} \frac{\sin(\pi y/a)\cos(\pi y/a)}{\sinh^2(\pi x/a) + \sin^2(\pi y/a)}$$
(4.6)

Ce champ est tel qu'une trajectoire en $y = \frac{a}{2}$ n'est pas déviée. Au voisinage des barreaux de grille, le champ tend à diverger. On s'intéresse alors à l'effet du champ sur la composante perpendiculaire de la vitesse au voisinage de la grille. En raison de la composante Ey du champ, la vitesse perpendiculaire est modifiée au passage de la grille d'une quantité Δv_y que l'on peut obtenir par intégration de l'équation du mouvement selon y:

$$\Delta v_y = \frac{e}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} E_y(x, y) dt \tag{4.7}$$

En remplaçant dt par dx/v_x et en formant l'hypothèse que v_x varie peu par rapport à $E_y(x, y)$ au passage de la grille, on obtient après intégration :

$$\Delta v_y = \frac{-e(E_2 - E_1)}{mv_x} [y - a/2] \tag{4.8}$$

Ce résultat peut être étendu empiriquement au cas d'une grille à trois dimensions, en approximant les contributions suivant y et z par le produit de (4.8) par un facteur $\frac{1}{2}$:

$$\Delta v_y = \frac{-e(E_2 - E_1)}{2mv_x} [y - a/2] \tag{4.9}$$

Nous considérons ici une situation médiane en $y_1 = \frac{a}{4}$, représentative d'une trajectoire type traversant la grille (dans ce cas le numérateur du champ est maximum). Dans notre cas $E_1 = 0$, et $E_2 = -(V_{G2} - V_{G1})/d$. Un calcul simple permet d'évaluer la distance à laquelle le champ transversal devient d'un ordre de grandeur plus faible que le champ axial, ce qui donne $x_0 = \frac{a}{\pi} ln[1 + \sqrt{2}]$, soit $140\mu m$ pour un pas de grille de $500\mu m$. Pour $x > x_0 \simeq \frac{1}{10}d$ on peut donc considérer que le mouvement selon y est uniforme. Le mouvement est alors décrit par le système suivant :

$$v_x = \frac{-eE_2t}{m} + v_0 cos\theta$$

$$v_y = v_0 sin\theta + \frac{-eE_2}{2mv_0 cos\theta} [y_1 - a/2]$$
(4.10)

où v_0 est la vitesse initiale de l'électron pénétrant dans l'analyseur. Pour une distance entre la première grille et la grille retardatrice de 1.2mm, une énergie de 80eV et une trajectoire en incidence normale, le déplacement obtenu à la condition de coupure est inférieur au centième de degré, et donc négligeable. L'approximation numérique 2D pour ce genre d'analyse est donc entièrement justifiée.

Lors des essais du dispositif, une pupille émettrice de 5 mm de diamètre a été utilisée. Dans ce cas, l'effet divergent au passage de la première grille est maximal pour des valeurs de θ s'approchant de 30° (Figure 4.9(b)). L'effet convergent dû au champ accélérateur suivant la grille retardatrice ne permet pas de redresser les trajectoires, et cette géométrie provoque donc une dégradation notable de la résolution. La simulation montre que la perte en transmission des trajectoires les plus externes du faisceau entraîne que $\frac{\Delta E}{E} = 0.337$, soit un étalement de 27V (au lieu de 20V si les grilles n'existaient pas). L'emploi d'une source de très faible dispersion angulaire est donc obligatoire avec ce type d'analyseur.

Analyseur sphérique : Les principales sources de dégradation de la résolution dans le cas d'un analyseur sphérique sont :

- le diamètre non nul du faisceau,
- le décallage de la source par rapport à l'axe de symétrie des hémisphères,
- les défauts de courbure des électrodes (dans notre cas par l'introduction d'un système d'anneaux).

Le calcul par simulation de la résolution théorique de l'analyseur est présenté en détail dans le paragraphe 4.3.2. L'analyseur hémisphérique est constitué d'un hémisphère externe de rayon b (le collecteur), et d'un hémisphère interne de rayon a, rayon moyen du premier anneau. Dans le cas d'une source centrée sur l'axe de symétrie, l'aberration majeure provient de la dimension transversale et de la dispersion angulaire du faisceau émis par un point de la source éloigné de l'axe. La géométrie de notre système permet de matérialiser une source de faible étendue au centre exact des hémisphères, au moyen du diaphragme (de rayon r_0), ce qui annule les aberrations dues à la position de la source le long de l'axe de symétrie. En effet en fonction de la distance p de la source à la surface de l'hémisphère interne, il existe une condition minimisant l'erreur sur l'énergie analysée, qui correspond au cas où l'image de la source est produite au centre des hémisphères. Cette condition, obtenue en calculant la distance focale du système qui est négative, et en utilisant les lois de l'optique Gaussienne, correspond à une distance p telle que $p = \frac{a}{1-(1/4\frac{b-a}{b})}$. En supposant un faisceau parallèle et monocinétique issu de cette source l'aberration en énergie dépendant du rayon s'écrit (Simpson, 1961) :

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{2r_0^2}{a^2} \cdot \frac{a}{b} \tag{4.11}$$

ce qui donne $\Delta E = 85meV$ à 80eV, pour un faisceau parallèle de rayon 0.125mm. Cette valeur donne une estimation de l'ordre de grandeur de la résolution que l'on peut attendre de l'analyseur. En réalité elle dépend également de l'erreur de centrage des éléments mécaniques, et de la dispersion angulaire du faisceau, prise en compte par la simulation numérique. L'emploi de l'analyseur sphérique apporte un gain notable en résolution: dans le cas d'une pupille émettrice de 5mm de diamètre placée à 5mm du trou d'entrée (angle limite de 30Σ), la dispersion énergétique obtenue par simulation est de $\Delta E = 1.2eV$ à 80eV (gain d'un facteur 20 environ par rapport à l'analyseur plan). Si l'on se limite à la dispersion angulaire équivalente à celle produite par un pixel (surface de $0.35 \times 0.35mm^2$, soit un angle limite de 2°), la simulation donne $\frac{\Delta E}{E} = 0.0021$, soit 170meV à 80eV ce qui est sensiblement meilleur que la performance de l'analyseur plan (gain d'un facteur 2 à 3).

La Figure 4.11 montre les défauts de sphéricité des équipotentielles provoqués par la différence de champ électrique au voisinage du diaphragme. Pour un pinceau monocinétique (80eV) issu du centre des hémisphères, et pénétrant dans l'analyseur avec un angle d'incidence moyen de 30° , la déviation angulaire moyenne du faisceau est de 13.6° .



FIG. 4.11: Analyseur sphérique. Equipotentielles et effet divergent du champ retardateur au niveau du diaphragme (trajectoires passant par le centre de l'analyseur).

Enfin le champ radial est légèrement déformé en raison des écarts des résistances du pont à leurs valeurs idéales. Les valeurs réelles des résistances sont prises en compte dans le modèle numérique, toutefois on peut donner un ordre de grandeur de ces variations. La répartition des potentiels V_i (V_1 (anneau 1 de rayon R_1) à V_n (anneau n c'est-à-dire le collecteur de rayon R_n)) des anneaux situés aux rayons moyens R_i est définie par:

$$V_i = V_1 + \frac{(V_1 - V_n)R_nR_1}{R_n - R_1} \left[\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_1}\right]$$
(4.12)

Les composantes de l'incertitude absolue correspondante s'écrivent :

– Pour le champ au niveau de l'anneau n°i:

$$\frac{\delta E_i}{E_i} = \frac{\delta V_i}{V_i} + 2\frac{\delta R_i}{R_i} \tag{4.13}$$

– Pour le potentiel au niveau de l'anneau n°i:

$$\frac{\delta V_i}{V_i} = \frac{\delta R_i / R_i^2}{\frac{V_1 (R_n - R_1)}{(V_1 - V_n) R_n R_1} + (\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_1})}$$
(4.14)

Les valeurs des résistances Res_i sont déterminées de manière récursive (pour un pont résistif de $Rtot = 1M\Omega$):

$$Res_{i} = R_{tot} \frac{R_{n}R_{1}}{R_{n} - R_{1}} \left[\frac{1}{R_{1}} - \frac{1}{R_{i}} - \sum_{j=1}^{j=i-1} Res_{j} \right]$$
(4.15)

Au niveau de l'anneau n°2, pour lequel on a $\frac{\delta Res_2}{Res_2} = 3.4\%$, la variation relative du rayon de l'équipotentielle est :

$$\frac{\delta R_2}{R_2} = \frac{\delta Res_2}{Res_2} \left(\frac{R_2}{R_1} - 1\right) \tag{4.16}$$

ce qui entraı̂ne une variation relative $\frac{\delta V_2}{V_2}$ du même ordre pour le potentiel associé.

4.3.2 Calcul de la résolution et de la fonction de transfert

Nous limitons la suite de cette partie au cas de l'analyseur hémisphérique, qui constitue l'élément central du dispositif de mesure. La mesure des distributions d'énergie et d'angle des électrons issus des cathodes s'effectue dans une gamme d'énergie ΔE_0 de [40 - 120eV], et dans un angle solide $\Delta \Omega_0$ correspondant à un secteur d'environ 120° d'ouverture centré sur l'axe de révolution. L'exploitation des mesures effectuées nécessite la détermination du facteur de transmission de l'instrument. Cette étape a été réalisée par simulation, puisque nous ne disposions d'aucun dispositif permettant la génération d'un faisceau d'électrons monocinétique et directionnel. Le flux d'électrons Φ_e parvenant au collecteur dans une bande passante ΔE_{FWHM} et un angle solide $\Delta \Omega$ inclus dans $\Delta \Omega_0$ est fonction du flux directionnel $\Phi_d(E, \mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$. Pour dN électrons d'énergie initiale dans l'intervalle E, E + dE, dont les vitesses sont comprises dans l'angle solide $d\Omega$ autour de la direction d'arrivée (θ, ϕ) dans l'analyseur, traversant une surface élémentaire dS de l'entrée de l'analyseur, et parvenant au collecteur, celui-ci est défini par :

$$\Phi_d(E, \mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = \frac{dN}{dS \cos\theta dE d\Omega dt} = \frac{2E}{m^2} \times \frac{dj}{d\varepsilon}(E, \mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$$
(4.17)

où $\frac{d\rho}{d\varepsilon}$ est la distribution dans l'espace des phases des électrons entrant dans la direction (θ, ϕ) avec une énergie comprise entre E et E + dE. La fonction de transfert du système retardateur, $I(E, \mathbf{v}, \mathbf{r})$ peut être représentée par une gaussienne telle que $I(E, \mathbf{v}, \mathbf{r}) = (\sqrt{2\pi}\Gamma(\mathbf{v}, \mathbf{r}))^{-1} \exp[-\frac{1}{2}(\frac{E}{\Gamma(\mathbf{v}, \mathbf{r})})^2]$, $\Gamma(\mathbf{v}, \mathbf{r})$ étant reliée à la résolution de l'instrument par $\Gamma = \alpha \Delta E_{FWHM}$, où α est un paramètre à ajuster et ΔE_{FWHM} la largeur à mi-hauteur. Cette dernière représente l'influence du potentiel V_{coll} du collecteur, puisque seuls les électrons possédant des énergies telles que $E - eV_{coll} \ge \Phi_{coll}$ où Φ_{coll} est le travail de sortie du collecteur sont collectés.

La distribution d'énergie mesurée des électrons émis $\frac{dj_{obs}}{d\varepsilon}(E, \mathbf{v}, \mathbf{r})$ dans la direction (θ, ϕ) est donnée par :

$$\frac{dj_{obs}}{d\varepsilon}(E, \mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dj}{d\varepsilon}(E', \mathbf{v}, \mathbf{r}, t)I(E - E', \mathbf{v}, \mathbf{r})dE'$$
(4.18)

Le flux d'électrons collecté prend alors la forme :

$$\Phi_e(t) = S \int_{\Delta\Omega} \int_{E-\frac{\Delta E_{FWHM}}{2}}^{E+\frac{\Delta E_{FWHM}}{2}} \frac{dj_{obs}}{d\varepsilon}(E, \mathbf{v}, \mathbf{r}) cos\theta dEd\Omega$$
(4.19)

où ΔE_{FWHM} représente ici la résolution sur toute la gamme d'angle, et S la surface d'entrée de l'analyseur. L'obtention de la distribution d'énergie des électrons émis requiert l'inversion de cette intégrale. En pratique toutefois une méthode généralement employée consiste à ajuster aux observations une fonction de distribution paramétrée, comme nous l'avons fait dans cette étude. La simulation de faisceaux monocinétiques d'électrons d'énergies variables entre 40eV et 120eV (par pas de 20eV), pénétrant dans l'analyseur avec des angles variables entre 0 et 60 degrés (par pas de 2°) nous a permis de calculer les valeurs de la transparence pour ces gammes. La Figure 4.12 illustre cette fonction de transfert dans le cas où le faisceau incident possède une énergie de 100eV.



FIG. 4.12: Transmission de l'analyseur hémisphérique en fonction de l'angle d'incidence $(0\Sigma - 60\Sigma)$ et du rapport entre le potentiel du collecteur Vcoll et son travail de sortie Φ_{coll} , pour un faisceau incident possédant une énergie de 100eV.

La Figure 13(b) montre le taux de transmission du signal en fonction de l'angle d'incidence, lorsque



FIG. 4.13: (a) Réponses moyennes (entre 0Σ et 56Σ) de l'analyseur 2D pour un faisceau de 100eVd'énergie incidente. La résolution moyenne obtenue est de 85 meV. (b) Transmission angulaire corrigée de l'extinction due à l'épaisseur non nulle du diaphragme. Les pertes restantes sont dues aux trajectoires d'angle élevé, déviées vers les anneaux.

Energie du faisceau incident (eV)	ΔE_{FWHM} sur la gamme $[0^{\circ}-56^{\circ}]$
40	38 meV
60	48meV
80	64meV
100	85 meV
120	98meV

TAB. 4.1: Résolution en fonction de l'angle d'incidence $(0\Sigma - 60\Sigma)$ pour différentes énergies du faisceau. La résolution de l'analyseur est meilleure que 98meV, dans sa gamme de fonctionnement.

le taux de collection est maximal. La valeur de l'angle limite de collection θ_{lim} ainsi déterminée est de 56 Σ . Le coefficient d'écrantage du faisceau dû à l'épaisseur *e* du trou du diaphragme peut s'exprimer simplement par : $Ne = N_0 \cdot (1 - \frac{r}{\phi})$ où N_0 et N_e sont les nombres d'électrons transmis en incidence normale et pour un angle d'incidence θ . ϕ représente le diamètre du diaphragme, *avec* $r = \frac{e}{d} \cdot \left[h \cdot \tan \theta - \frac{\phi}{2}\right]$, *et* $h = \sqrt{y^2 + z^2}$ où d est la distance de la surface émettrice au diaphragme, et y et z les coordonnées du point émetteur. Cette fonction permet d'évaluer la perte en transmission résultant des trajectoires pénétrant dans la zone d'analyse et non collectées, ce qui donne la courbe corrigée de la Figure 13(b). La Figure 13(a) permet d'obtenir une résolution moyenne de l'analyseur à 100eV sur toute la gamme d'angles de 85*meV*. La résolution moyenne de l'analyseur sur les gammes d'angles et d'énergie est meilleure que 98meV (Tableau 4.1). Enfin l'angle solide moyen d'un sous-faisceau pénétrant dans l'analyseur sur la gamme d'angles considérée est de 2,5°. Cette valeur correspond à la résolution angulaire moyenne du faisceau analysé.

4.3.3 Modèle 3D, évaluation des différences apportées par la géométrie non axisymétrique entre la cathode et le diaphragme

Plusieurs limitations inhérentes au modèle axisymétrique nous ont poussés à considérer un modèle à 3 dimensions. Certains modes de fonctionnement des matrices (notamment le mode pixel) correspondent à une polarisation non uniforme des grilles d'extraction, entraînant une perturbation des trajectoires (cf. Figure 5.5). La simulation de l'émission par des éléments répartis de manière non



FIG. 4.14: Exemple de configuration asymétrique des potentiels d'une matrice de micropointes fonctionnant en mode pixel.

symétrique par rapport à l'axe n'est pas envisageable dans le cadre du modèle 2D (cas du déplacement d'un pixel suivant une direction perpendiculaire à l'axe). En dernier lieu une géométrie plus réaliste des parties support de cathode et électrode de blindage, à sections carrées, permet de tenir compte de l'influence de leurs potentiels sur les trajectoires. Un modèle à 3 dimensions (possédant maille de $100\mu m$) a donc été implémenté, limité à la partie amont de l'analyseur (située entre les grilles et le diaphragme), comme le montre la Figure 4.15(a), en raison de la place mémoire très importante requise par ce type de géométrie. Lors de la simulation de l'expérience les modèles 2D et 3D sont alors utilisés de manière couplée. L'émission des électrons est modélisée dans le modèle 3D et les électrons impactants la surface d'entrée de l'analyseur 3D sont caractérisés par leurs vitesses et leurs directions d'arrivées. Ils constituent alors le faisceau d'entrée pour la partie avale de la simulation (la cavité hémisphérique de l'analyseur), constituée par le modèle 2D.

Cependant le maillage de $100\mu m$ du modèle 3D ne permet pas de reproduire une bulle de potentiel équivalente à celle du modèle 2D, en appliquant des potentiels identiques aux électrodes représentant les anneaux. C'est pourquoi dans le modèle 3D une électrode hémisphérique, qui matérialise l'équipotentielle associée au second anneau métallisé en partant du centre, permet, par ajustement de son potentiel, de reproduire une bulle de potentiel strictement identique à celle produite par le modèle 2D. Pour effectuer le raccordement entre ces deux modèles un jeu de points appartenant aux équipotentielles de la bulle du modèle 2D est choisi. Le potentiel de l'électrode hémisphérique du modèle 3D est alors déterminé de manière à faire correspondre les équipotentielles du modèle 3D avec celles du modèle 2D. Dans l'exemple de la Figure 4.15(b) il est nécessaire d'imposer un potentiel de -998.6V. Ce potentiel sert donc uniquement de paramètre d'ajustement permettant d'assurer la correspondance des bulles de potentiel formées à l'entrée de l'analyseur par la pénétration du champ retardateur dans



FIG. 4.15: Comparaison des modèles 2D et 3D. (a) Coupe des électrodes du modèle 3D (partie amont de l'analyseur). Le potentiel du blindage imposé dans l'expérience est de 0.5V. (b1 et b2) Equipotentielles au voisinage de l'entrée dans le cas du modèle 2D(b1) et 3D(b2). (c) Comparaison des courants collectés dans le cas d'un faisceau de 120eV en incidence normale.

les modèles 2D et 3D. Il ne correspond à aucun potentiel dans le dispositif expérimental. La figure 4.15(c) permet de comparer l'évolution des courants normalisés collectés en fonction du potentiel du collecteur, dans le cadre des deux modèles (3D+2D et 2D), pour un faisceau parallèle de 120eV en incidence normale sur l'entrée. La correspondance entre les deux courbes est suffisante pour permettre une simulation globale de l'expérience.

4.3.4 Etude des sources de perturbation de la mesure

Nous présentons dans ce paragraphe l'étude de plusieurs sources de perturbation potentielles susceptibles d'affecter les mesures et/ou de dégrader la résolution de l'analyseur. Ces effets perturbateurs sont essentiellement l'influence du champ magnétique sur les trajectoires électroniques, et les électrons secondaires émis par les surfaces bombardées par les électrons (diaphragme, collecteur, anneaux).

4.3.4.1 Influence du champ magnétique terrestre.

A proximité immédiate du bâti, le champ terrestre a comme composante $B_{NS} = 0.15g$, $B_{vertival} = 0.3g$, $B_{EO} = 0g$. Ces valeurs ont été prises en compte dans la simulation numérique de l'expérience pour le calcul des trajectoires. L'exemple de la Figure 4.16 montre la déviation subie suivant y et z par un électron collecté pénétrant dans l'analyseur avec un angle de 20°, et une énergie de 120eV, au niveau de la surface du collecteur. Celle-ci est de l'ordre de 200 μm suivant y dans le plan xy et de 1.5mm suivant z dans le plan xz, et du même ordre dans le plan yz. Cet effet est pris en compte dans



FIG. 4.16: Projections dans les plans xy et xz de deux trajectoires possédant un angle d'incidence de 20° et une énergie de 120eV. Trait rouge: trajectoire sans champ magnétique. Trait vert: trajectoire avec champ magnétique terrestre.

la simulation numérique de l'expérience, et entraîne une perte de résolution d'environ 10%.

Les champs magnétiques produits par les éléments de pompages (pompes turbomoléculaires), ou les appareils électriques (alimentations et autres) sont négligeables au-delà d'une distance d'environ 10*cm*, donc n'influent pas au niveau de l'analyseur.

4.3.4.2 Influence des électrons secondaires

Pour modéliser l'influence des électrons secondaires, nous avons utilisé le modèle phénoménologique de Furman and Pivi (2002), fondé sur une description macroscopique du processus d'émission. Ce modèle fut initiallement developpé pour l'étude de l'effet de nuage électronique présent dans les anneaux de stockage, dont il détériore les performances. Cet effet correspond à la production d'électrons secondaires à partir des parois des chambre à vide bombardées par des photoélectrons. La présence de ces électrons secondaire entraîne alors la pertubation des faisceaux de particules chargées mis en oeuvre dans les anneaux.



Les paramètres d'entrée du modèle sont l'énergie E_0 des électrons incidents et leur angle θ_0 par

rapport à la normale à la surface de la cible. Le modèle est construit de manière à reproduire trois composantes du rendement total de l'émission secondaire $\delta = \delta_{vrais} + \delta_{reflechis} + \delta_{rediffuses}$, ainsi que le spectre énergétique des électrons secondaires $\frac{d\delta}{dE}$. Les paramètres du modèle (voir la description qui suit) sont ajustés par rapport à ces deux contraintes. Les trois composantes du rendement correspondent à trois espèces de secondaires : les électrons secondaires vrais d'énergies de l'ordre de 30 à 50eV, des électrons réfléchis de manière élastique, d'énergies proches de celles du faisceau incident, et des électrons dits "rediffusés", d'énergie intermédiaire, et dont l'origine provient d'interactions plus complexes. Les valeurs des paramètres définissant les fonctions de distributions énergétiques et angulaires sont déduites de l'ajustement du modèle sur des ensembles de données expérimentales représentatives (notamment l'Acier Inox 304, comme le montre la Figure 4.17). La population de secondaires est sélectionnée par un tirage du type Monte Carlo, respectant les règles suivantes : l'énergie d'un électron émis ou la somme des énergies de plusieurs électrons émis ne dépasse jamais celle d'un électron incident; les angles d'émission de n secondaires émis sont décorrélés, indépendants de l'énergie et de l'angle d'incidence, et indépendants des énergies des électrons correspondants. Les fonctions δ et $\frac{d\delta}{dE}$ reconstruites à l'aide des populations générées sont cohérentes avec les paramètres d'entrée, de sorte que l'intégrale de $\frac{d\delta}{dE}$ sur les énergies vaut δ .

Le modèle est basé sur une approche probabiliste. On considère qu'un électron d'énergie cinétique E_0 incident avec un angle θ_0 par rapport à la normale à la surface du matériau, peut engendrer un certain nombre n d'électrons secondaires, avec les énergies cinétiques E_1, E_2, \ldots, E_n , émis dans les angles solides $\Omega_1 = (\theta_1, \phi_1), \ldots, \Omega_n = (\theta_n, \phi_n)$. Si les $P_n(E_0, \theta_0), n = 1, \ldots, \infty$ sont les probabilités d'émission de chaque électron secondaire, l'idée est de proposer une formulation phénoménologique de la probabilité jointe d'émission des n électrons :

$$\Gamma_n = \frac{dP_n}{dE_1 d\Omega_1 \dots dE_n d\Omega_n} \tag{4.20}$$

cohérente avec les données d'entrées δ , et $\frac{d\delta}{dE}$, c'est-à-dire telle que :

$$\frac{d\delta}{dE} = \sum_{n=1}^{\infty} \int (dE)_n (d\Omega)_n \Gamma_n \sum_{k=1}^n \delta(E_k - E)$$
(4.21)

On cherche alors une expression des P_n , qui permette d'exprimer les fonctions de distributions associées à chacune des composantes du rendement de l'émission secondaire. Les trois composantes du rendement total δ sont telles que :

$$\delta = \delta_e + \delta_r + \delta_{ts} = \frac{(I_e + I_r + I_{ts})}{I_0} \tag{4.22}$$

avec:

1. la composante réfléchie élastiquement : c'est la partie I_e du courant incident I_0 réfléchie élastiquement. Le rendement $\delta_e(E_0, 0)$ correspondant pour un angle d'incidence nul (obtenu par ajustement sur des données) s'écrit :

$$\delta_e(E_0, 0) = P_{1,e}(\infty) + [\hat{P}_{1,e} - P_{1,e}(\infty)]e^{-(\|E_0 - E_e\|/W)^p/p}$$
(4.23)

où \hat{E}_e , $P_{1,e}(\infty)$, $\hat{P}_{1,e}$ et W sont des paramètres ajustables. Ce rendement est lié à sa densité de probabilité $f_{1,e}$ par :

$$\delta_e(E_0, \theta_0) = \int_0^{E_0} dE f_{1,e}(E)$$

Le rendement est maximum pour $E_0 = \hat{E}_e$, pourvu que $P_{1,e} > P_{1,e}(\infty)$.

2. la composante rediffusée : c'est la portion I_r rediffusée par quelques atomes du matériau, dont le rendement s'écrit :

$$\delta_r(E_0, 0) = P_{1,r}(\infty)[1 - e^{-E_0/E_r)^r}]$$
(4.24)

où $P_{1,r}(\infty)$, E_r et r sont des paramètres ajustables. La densité de probabilité $f_{1,r}$ est associée à la portion correspondante du spectre d'énergie, et de même on a :

$$\delta_r(E_0, \theta_0) = \int_0^{E_0} dE f_{1,r}(E)$$

3. la composante des secondaires vrais: c'est la portion I_{ts} interagissant de manière plus complexe avec le matériau. Dans ce cas le rendement s'exprime directement en fonction de l'énergie incidente et de l'angle par:

$$\delta_{ts}(E_0,\theta_0) = \hat{\delta}(\theta_0) D[E_0/\hat{E}(\theta_0)] \tag{4.25}$$

où D(x) représente une fonction d'échelle telle que :

$$D(x) = \frac{sx}{s - 1 + x^s} \tag{4.26}$$

, les paramètres ajustables étant s (s > 1), $\hat{\delta}$ (rendement maximum), \hat{E} (énergie associée au rendement maximum), et la densité de probabilité $f_{n.ts}$.

La distinction entre les composantes rediffusées et réfléchies a l'avantage de permettre un ajustement précis des parties correspondantes des spectres d'énergie expérimentaux.

La dépendance angulaire des différents rendements dépend du type de surface. Pour des surfaces de faible rugosité, une distribution en puissance inverse de $cos\theta_0$ semble généralement admise. Pour des surfaces plus rugueuses (parois d'une chambre à vide, métaux non cristallins et rugueux) une loi de la forme $1 + a_1(1 - cos^{a_2}\theta_0)$ peut être utilisée. Quelques valeurs de coefficients a_1 et a_2 sont proposées par Furman and Pivi (2002) pour les matériaux considérés. Dans un premier temps nous considérons pour simplifier la simulation que tous les matériaux utilisés dans l'analyseur (molybdène du diaphragme, inox du collecteur, or des anneaux, et alumine) produisent des secondaires à partir des même paramètres (inox 304), avec la loi d'angle générique suivante :

$$\delta_{i=(e,r,ts)}(E_0,\theta_0) = \delta_{i=(e,r,ts)}(E_0,\theta_0)[1 + a_1(1 - \cos^{a_2}\theta_0)]$$
(4.27)

Le nombre n d'électrons générés par électron incident suit une loi de Poisson. Si n = 1, l'électron secondaire peut être de l'une des trois espèces (secondaire vrai, réfléchi ou rediffusé), si $n \ge 2$ les électrons produits sont des secondaires vrais. Les sorties de l'algorithme implémenté ont été comparées



FIG. 4.18: Comparaison des spectres d'énergie des électrons secondaires calculés par le modèle du CETP (mauve) et celui de Furman and Pivi (2002) (bleu), pour $\delta = 1.887$, et un faisceau monocinétique d'électrons incidents d'énergie $E_0 = 300 \, eV$.

avec des résultats fournis dans l'article pour l'Inox 304, en utilisant des paramètres d'entrée identiques (Figure 4.18).

La Figure 4.19 montre les spectres des électrons secondaires produits lorsque le faisceau émis rencontre le diaphragme, le collecteur, et par des électrons repoussés (ou accélérés) sur les anneaux. La tension d'extraction est ici de 100V, et la distribution des électrons incidents sur le diaphragme est représentée sur le graphique 4.19(a). Comme le montre le graphique 4.19(a) la distribution des électrons en entrée de l'analyseur subit un léger étalement, essentiellement dû à l'effet de la bulle de potentiel précédemment modélisée. Des secondaires créés sur le diaphragme sont essentiellement présents aux énergies proches de 10eV, donc non susceptibles de perturber la mesure. Les graphiques 4.19(b) et (c) présentent les distributions d'énergies des électrons secondaires créés respectivement sur le système d'anneaux concentriques et sur le collecteur, pour des tensions de collections fixées à 20, 30, et 50V, c'est-à-dire immédiatement en amont et en aval de la distribution émise, et sensiblement plus loin (voir les courbes de courant de la Figure 4.20).

Dans cette configuration le diaphragme est polarisé à 120V, et comme on peut le voir sur la Figure 4.20 les électrons créés pour $V_{coll} = 20V$ ne représentent pas une contribution significative au courant total collecté. En revanche on note une forte augmentation de l'amplitude et de la largeur des spectres en fonction du potentiel du collecteur. La compréhension de ces courbes requiert de garder à l'esprit l'énergie moyenne de la distribution, de l'ordre de 91V lors de cette simulation. Si l'on examine la situation au niveau du collecteur, on note une progression de l'étalement du spectre entre 30 et 50V, traduisant une augmentation logique du rendement (l'intégration des spectres montre un courant supérieur de 50% dans le cas où $V_{coll} = 50V$ par rapport au cas où $V_{coll} = 30V$). Le pic à 5eV pour $V_{coll} = 30V$ traduit l'amplitude moyenne de l'accélération subie par les électrons incidents.



FIG. 4.19: Spectres des électrons secondaires produits sur les électrodes bombardées par le faisceau émis (diaphragme, anneaux, collecteur). (a) Spectre d'énergie des électrons incidents pour Vgc=100V (rouge), et spectre des électrons entrant dans l'analyseur (comprenant des secondaires créées sur le diaphragme) (vert). (b) Spectre d'énergie des secondaires produits à partir des anneaux, pour différentes valeurs du potentiel du collecteur V_{coll} (20, 30, et 50V). (c) Spectre d'énergie des secondaires produits à partir du collecteur, pour différentes valeurs de V_{coll} (20, 30, et 50V).

A 50V le centre de la distribution des secondaires issus du collecteur est proche de 20V, et son étalement beaucoup plus conséquent est cohérent avec une production de secondaires vrais (dont la borne supérieure est toujours fixée par l'énergie incidente). Au niveau du système d'anneaux on note une forte augmentation de l'amplitude des spectres avec V_{coll} , alors qu'à l'inverse l'intensité du champ accélérateur vers les anneaux diminue. L'écart d'énergie moyenne des électrons provenant du collecteur lorsque celui-ci est polarisé à 50V et 30V est du même ordre que la diminution d'intensité du champ entre le système d'anneaux et le collecteur. De ce fait, l'augmentation d'amplitude suit globalement l'augmentation du rendement de la production de secondaires au collecteur (soit environ 50% entre ces deux cas). Il faut toutefois garder à l'esprit les limites de cette modélisation qui d'une part utilise les paramètres de l'inox pour les anneaux en or, et d'autre part néglige les électrons incidents sur la céramique. En outre les valeurs de rendement de production de secondaires dépendent beaucoup du conditionnement du matériau considéré. Une compilation des valeurs déterminées dans 125 références



FIG. 4.20: Simulation de la mesure avec et sans la prise en compte des secondaires. Le graphique inséré représente un grossissement de la zone de potentiel du collecteur comprise entre 10 et 40V. La courbe rouge représente le courant collecté sans électrons secondaires. La distribution émise possèdent une énergie moyenne $E_{moy} = 91.7eV$ et un écart-type de 4.5eV. La courbe verte reproduit la mesure en tenant compte des électrons secondaires. Dans ce cas l'ajustement des paramètres de la distribution émise donne une énergie moyenne $E_{moy} = 93.2eV$ et un écart-type de 3.8eV.

(jusqu'à l'année 2000) a été effectuée et se trouve disponible en ligne (http://www.napchan.com/bse). Cependant les données pour l'inox ne sont pas nombreuses. On peut citer notamment une autre référence (Fonzar Pintão and Hessel, 2000) qui donne à 100eV un rendement de l'ordre de 2, c'est-àdire supérieur à celui de la Figure 4.17.

Matériaux	δ_{max}	Emax (eV)
Molybdène	1.25	375
Inox	2.3	300
Or	1.4	800
Alumine	2-9	ND

TAB. 4.2: Rendements de l'émission d'électrons secondaires pour différents matériaux utilisés dans l'expérience. ND = Non Définie.

Le Tableau 4.2 reporte à titre indicatif différents rendements pour les matériaux constituant l'expérience. Les rendements sont en général très variables suivant la nature cristalline des matériaux (et leur état de surface), si bien qu'il est difficile d'estimer une marge d'erreur significative par rapport à la situation qui nous préocuppe. En revanche on peut voir que le rendement de l'alumine est proche de celui de l'inox et que celui de l'or est inférieur d'environ 25%, ce qui suggère une légère surestimation de l'effet dans notre cas.

La Figure 4.20 permet de comparer l'évolution du courant collecté avec et sans la présence d'électrons secondaires, lorsque les électrons pénétrant dans l'analyseur possèdent les distributions de la Figure 4.19(a). La présence de secondaires dégrade la forme du signal mesuré. Une cassure nette apparaît à l'endroit où la distribution cesse d'être collectée dans des conditions idéales. Le courant augmente lentement par la suite, en raison des secondaires vrais récupérés par le collecteur lorsque le champ retardateur diminue, puis devient accélérateur.



FIG. 4.21: Comparaison des courants crêtes mesurés en fonction de la tension du collecteur, pour différents pixels, polarisés à une tension d'extraction de 60V:(17,15) 1-vert, (17,15) 2-noir, (9,14) 2-jaune, et du courant collecté simulé en tenant compte de la production d'électrons secondaires (courbe rouge).

Le nombre de paramètres associés au modèle d'émission d'électrons secondaires, d'une part, et l'incertitude sur les paramètres corespondants aux matériaux d'autre part, ne nous ont pas permis de construire un modèle global de l'émission possédant la précision suffisante pour permettre un ajustement satisfaisant aux courants mesurés (qui demanderait de caractériser chaque matériau susceptible de produire des secondaires par une courbe de rendement et de distributon d'énergie). L'évolution du courant simulée, tenant compte des électrons secondaires, peut en revanche être comparée directement aux mesures de distribution d'énergie qui sont présentées et analysées dans la section 5.1.4 et reproduites en partie sur la Figure 4.21.

Cette Figure montre en effet l'évolution du courant collecté pour trois pixels distincts dont la tension d'extraction est fixée à 60V (courbes noire, jaune, et vertes). Nous avons superposé à ces courbes l'évolution du courant modélisée (courbe rouge), de manière à comparer les pentes expérimentales et théoriques. On constate de manière intéressante que notre modèle permet de reproduire de manière relativement précise, et malgré les approximations, l'augmentation lente du courant que l'on observe après le saut de courant dû à la distribution des électrons que l'on cherche à mesurer. Le pente observée pendant le saut reste cependant assez approximative dans ce cas, car nous n'avons pas ajusté de façon précise la distribution provenant des cathodes. Ce bon accord est observé pour des niveaux de courants collectés relativement faibles, ce qui n'est pas toujours le cas. En effet pour des tensions d'extractions supérieures à environ 70V, comme le montre par exemple la Figure 5.10 de la section 5.1.4, les signaux à 80 et 100V apparaissent plus perturbés en raison de fluctuations de courant provenant en partie des effets capacitifs engendrés à l'intérieur de la cavité par les pulses imposés aux grilles d'extraction. D'autre part même à 60V certains pixels émettent beaucoup plus que d'autres, et dans ce cas le signal n'est pas aussi stable (pixels (9,15) et (9,16) et de la Figure 5.9).

Notre simulation fait donc apparaître clairement que la présence de secondaires entraîne une sous estimation de l'énergie moyenne et de la largeur de la distribution.

L'outils développé nous permet donc de quantifier la précision de la mesure associée à la présence des secondaires. A l'aide de la simulation représenté sur la Figure 4.20, nous obtenons en effet une sous-estimation de l'ordre de 1.5V de la valeur de l'énergie moyenne, et de 0.7eV sur l'écart-type de la gaussienne que nous utilisons pour modéliser la distribution en énergie. Cet effet est alors pris en compte dans la suite lors de l'inversion des mesures, en appliquant une majoration de 10% à l'énergie moyenne et à la largeur à mi- hauteur des distributions calculées grâce à la simulation numérique de l'expérience, effectuée sans la prise en compte des électrons secondaires. Cette majoration est toutefois déduite du cas où l'énergie du faisceau analysé est situé en haut de la gamme (100eV), et donc dans la situation où le rendement de production, et donc la perturbation liée aux électrons secondaires, est la plus importante. Notons que l'incertitude de cette correction, et sa validité, sont très dépendantes des paramètres appliqués pour la simulation des secondaires. A partir des fourchettes de valeurs prises par les rendements de production de secondaires des matériaux concernés, nous estimons que l'incertitude relative de cette correction est de l'ordre de 30%, aussi bien pour l'énergie moyenne que pour l'écarttype. En outre étant donné les valeurs de rendement retenues pour l'inox, plutôt grandes, on peut toutefois s'attendre à ce que la correction réelle soit inférieure aux 10% que nous avons adoptés.

CHAPITRE 5

Etude expérimentale : principaux résultats obtenus lors de la caractérisation des composants

5.1 Cathodes à micro-pointes

5.1.1 Mise en œuvre

Le montage que nous avons réalisé permet aux cathodes de fonctionner en régime pulsé et suivant l'un des 4 modes explicités sur la Figure 5.1 (mode pixel, mode ligne, mode colonne ou mode total).

Lors de la mesure de la caractéristique courant-tension, le courant émis par la cathode est mesuré sur le diaphragme de l'analyseur placé à 5mm de la surface du composant, et polarisé à un potentiel ajustable, généralement voisin de +200V, pour éviter un retour important d'électrons secondaires vers la surface émettrice. Le potentiel d'extraction est égal à Vgc=Vg-Vc où Vg est le potentiel appliqué à la grille, et Vc le potentiel appliqué au contact cathodique.

La Figure 5.2 est représentative du spectre des gaz résiduels typiquement présents dans l'enceinte de test lors de nos mesures. Après un pompage de plusieurs semaines les composants majoritaires sont l'azote et l'oxygène moléculaires (28 et 32 uma), avec une proportion notable d'hydrogène attribuée au dégazage des parois. On peut noter que les pressions partielles d'oxygène et d'azote sont équivalentes à celles que l'on trouverait dans la haute atmosphère de Mars à des altitudes d'environ 150 km, au maximum d'activité solaire.

5.1.2 Caractéristique courant-tension

Nous présentons ici différents tests d'émission représentatifs des différents modes de fonctionnement.

La Figure 5.3 montre la caractéristique I(Vgc) d'une cathode de 32×32 pixels, de surface 11.2×11.2 mm². La tension d'extraction est modulée à une fréquence de 100 Hz avec un rapport cyclique (durée relative d'émission) de 10% ce qui correspond donc à 1ms d'émission toutes les 10ms. Le courant crête obtenu est de 5.5mA à Vgc=90V. Sur cette figure nous avons également représenté un fit à la loi de Fowler-Nordheim, par rapport auquel on observe sans surprise une déviation importante du courant


FIG. 5.1: Modes de fonctionnement d'une cathode à micropointes. L'ensemble émet lorsque les différences de potentiels entre toutes les grilles (Vg) et tous les contacts cathodiques (Vc) sont positives (mode total). L'émission en mode ligne s'obtient en pulsant le contact de grille d'une ligne entre Vc et Vg, les autres lignes étant polarisées au potentiel continu Vc, qui est celui des cathodes, fixé à 0Vdans cet exemple. Lorsque le contact cathodique alimentant les pixels d'une colonne a est maintenu à potentiel continu Vc_a (égal à 0V dans cette configuration), alors que toutes les grilles sont pulsées à un niveau positif Vg (par exemple 100V), et que toutes les autres colonnes b sont pulsées entre Vc_a et Vc_b (par exemple 70V), tel que Vc_b > Vc_a et Vg - Vc_b reste inférieur à 40V (seuil d'émission) pour les pixels des colonnes b, on obtient l'émission de la colonne a. On passe en mode pixel lorsque à partir du mode colonne, les potentiels des lignes autres que celle contenant le pixel dont on veut provoquer l'émission sont maintenus au niveau bas Vc_a (0V dans l'exemple).



FIG. 5.2: Spectre typique des gaz résiduels majoritaires présents dans le caisson de test.



FIG. 5.3: Caracteristique courant-tension d'une matrice de 32 lignes par 32 colonnes (triangles), associée à un fit par la loi de Fowler-Nordheim (courbe bleue). Le courant crête atteint 5.5mA pour Vgc=90V. La pression lors de cette mesure est de 1.2×10^{-7} mbar.

émis pour des tensions d'extraction supérieures à 70V, que l'on peut attribuer en partie à l'influence de la couche résistive (Baptist et al., 1997). Dans de telles conditions on observe également un dégazage important, pouvant entraîner une hausse de pression à un niveau proche de 10^{-6} mbar, que nous attribuons à la fois à l'effet du bombardement électronique de l'anode collectrice (le diaphragme), et à l'impact sur les pointes des ions formés dans l'espace entre le composant et l'anode, et qui sont accélérés vers les potentiels les plus négatifs. Ce dégazage rend la stabilisation du courant dans le temps très lente et par la suite nous avons préféré limiter le courant moyen émis, soit en travaillant à des taux de répétition plus faibles, soit en limitant le nombre de pixels émetteurs. Ainsi, de façon générale, nous avons préféré le mode colonne pour ce type de mesure, qui permet d'avoir un potentiel uniforme sur l'ensemble des grilles.

La Figure 5.4(bb) donne un exemple de caractéristique courant-tension obtenue en mode colonne ainsi que la courbe de Fowler-Nordheim associée. Les mesures simultanées des courants circulants dans le diaphragme et les contacts cathodiques (Figure 5.4(aa)) montrent que le courant intercepté par les grilles reste très faible (< 5%) devant le courant collecté par le diaphragme. Le courant crête atteint 340 μA à Vgc=85V et environ 800 μA à Vgc=100V. L'ajustement de la droite de Fowler-Nordheim montre de même que précédemment une déviation des mesures expérimentales (Iréel<Ithéorique).

Nous avons par ailleurs réalisé quelques essais de fonctionnement en régime continu, bien que ce mode soit fortement déconseillé par le fabricant, afin de déterminer le rapport cyclique limite permettant d'augmenter le courant moyen émis, pour améliorer les performances des sources. Dans tous les cas nous avons observé une diminution lente du courant émis et une forte augmentation du courant de grille, corrélée à un fort dégazage. Après l'arrêt du test et la reprise de l'émission dans le même mode, le courant obtenu n'a jamais retrouvé sa valeur initiale, semblant indiquer une dégradation irréversible du composant.

En dernier lieu nous présentons sur la Figure 5.5 un exemple de caractéristique courant-tension obtenue en mode pixel. Le courant crête atteint, pour une tension d'extraction de 100V, une valeur de $23.1\mu A$ (ramenée à la surface du pixel la densité de courant correspondante est de l'ordre de 23 mA.cm⁻²).



FIG. 5.4: Courant moyen émis en mode colonne (sur cette figure le courant augmente dans le sens des ordonnées négatives). (aa) Bilan de courant effectué sur une colonne stabilisée (avec un rapport cyclique de 50%), lors de balayages successifs effectués sur la caractéristique I = f(V) entre 20 et 85V. En bleu apparaît le courant collecté à l'anode (positif), en rouge le courant émis par les pointes (négatif), en vert leur différence, qui correspond au courant intercepté par la grille d'extraction. En général ce courant de fuite ne dépasse pas 10 à 15% du courant total (il est inférieur à 5% dans ce cas). (bb) Caractéristique courant-tension typique d'une colonne de 32 pixels (le rapport cyclique est de 10%), accompagnée de sa droite de Fowler-Nordheim. Le courant crête atteint à 100V est de l'ordre de $800\mu A$.



FIG. 5.5: Caractéristique courant-tension obtenue en mode pixel. Le courant crête atteint, pour une tension d'extraction de 100V, une valeur de $23.1\mu A$.

5.1.3 Stabilité, fluctuations et durée de vie

5.1.3.1 Stabilité

La Figure 5.6 montre, pour une matrice LETI, l'évolution du courant émis pendant 30 heures, après stabilisation de l'émission, en mode colonne (32 pixels). La tension d'extraction Vgc est maintenue à 90V, et le rapport cyclique à 10%. La dérive totale du courant observée est de $4.5\mu A$ pour un courant moyen d'environ $66\mu A$ soit environ 0.2% par heure.

Cette observation peut être comparée à celle de Reuss and Chalamala (2003), qui ont étudié l'influence de gaz inertes, Ar, Xe, Ne, He, (habituellement présents dans les environnements d'écrans plats), ainsi que O_2 et H_2 , sur l'émission de cathodes de type Spindt en Mo, placées à 1mm d'une anode en inox polarisée à 300V, et exposées à des pressions partielles de gaz variant entre 10^{-8} et 10^{-5} torr, sur des durées de l'ordre de 100 heures.



FIG. 5.6: Evolution sur 30 heures du courant moyen émis par une colonne (avec un rapport cyclique de 10%), pour une tension d'extraction fixée à 90V. Le valeur crête moyenne est de $660\mu A$.

Leurs mesures montrent qu'à l'exception de l'hydrogène, ces gaz provoquent une baisse du niveau de courant pouvant atteindre 90% dans le cas de O_2 , pour des pressions de l'ordre de 10^{-5} torr. Nos mesures, ramenées à des pressions équivalentes, montrent une évolution nettement plus rapide de la dégradation, qui pourrait être liée au rapport cyclique, donc au temps effectif d'émission beaucoup plus grand dans notre cas que dans celui des écrans plats, où il est de l'ordre de 1/250. Dans Reuss and Chalamala (2003), une croissance lente du courant est observée lorsque l'exposition au gaz est arrêtée, et que la pression retrouve son niveau de base de 10^{-10} torr, semblant indiquer une réversibilité du phénomène.

L'effet de l'hydrogène est inverse : il provoque clairement une augmentation du niveau de l'émission, (d'un facteur 2 environ) qui demeure ensuite stable sur plusieurs centaines d'heures. Cette augmentation du courant émis pour une tension d'extraction donnée en présence d'hydrogène a également été observée dans de nombreuses autres expériences (Constancias, 1998; Temple, 1999; Schwoebel and Spindt, 1993). Cet effet est interprété par une diminution apparente du travail de sortie des pointes due à des atomes adsorbés (pouvant aller jusqu'à 1eV dans les conditions de Schwoebel and Spindt (1993)), et une légère augmentation de la surface active (limitée à un facteur 2 d'après Schwoebel and Spindt (1993), par ailleurs accompagnées dans le cas de Constancias (1998) par un élargissement apparent de la distribution énergétique des électrons. On peut également noter que les auteurs relèvent une influence certaine de la distance entre la cathode et l'anode collectrice : lorsque celles-ci est sont séparées par une distance plus grande, la vitesse de décroissance du courant est plus faible.

Les causes principales de dégradation de l'émission généralement invoquées sont de trois types : érosion des pointes et diminution du facteur de champ par bombardement ionique, adsorption d'atomes à la surface augmentant le travail de sortie, et implantation ionique. Les effets thermiques ne semblent pas importants. L'implantation ionique a été proposée (Reuss and Chalamala, 2003) pour expliquer la réversibilité des processus de dégradation évoquée précédemment. Suivant ce mécanisme, des ions créés majoritairement à proximité des émetteurs sont accélérés vers les pointes, qu'ils atteignent avec des énergies de quelques centaines d'eV. Dans ces gammes d'énergie, et pour les espèces considérées, l'implantation domine le processus de criblage (que l'on retrouve ici dans le cas de surfaces solides !). De ce fait, l'augmentation progressive du nombre d'ions implantés a tendance à augmenter la largeur de la barrière tunnel, en formant une région de résistivité importante à la surface des pointes. En présence du gaz, les phénomènes opposés d'implantation et de désorption de gaz aboutissent à un équilibre, que les auteurs associent à la stabilisation du courant observée. L'arrêt de l'exposition au gaz entraîne la prépondérance de la désorption, et l'émission recommence à croître à une vitesse lente, dépendant de la vitesse de désorption.

5.1.3.2 Fluctuations



FIG. 5.7: Fluctuations de l'émission observées en mode pixel. L'unité de temps en abscisse est la minute.

La Figure 5.7 montre les fluctuations en courant typiques que nous avons enregistrées. Le cas présenté correspond au courant émis par un pixel, sur une durée de 120 minutes, pour une tension d'extraction de 55V, et avec une fréquence de mesure de 0.1Hz. Le courant moyen est de l'ordre de 300nA à $\pm 20nA$ (avec un rapport cyclique de 30%), soit des variations de l'ordre de 7%. Des études statistiques menées dans des conditions d'ultra-vide sur des pointes individuelles (Spindt et al., 1976; Miyamoto et al., 2003), montrent principalement quatre modes de fluctuations lors de l'émission : un mode de fluctuations par *palier* pendant lequel des transitions abruptes apparaissent entre des niveaux stables d'émissions de durées comprises entre 10^{-1} et 10^2 secondes, un mode de type *impulsionnel* où des impulsions d'amplitudes voisines et de courtes durées, quelques dizaines de μs , apparaissent par séquences de durées variables, pouvant aller jusqu'à plusieurs ms, un mode de fluctuations *basse fréquence*, dans des gammes comprises entre 10Hz et 100kHz, et enfin un mode *haute fréquence*, dans des gammes supérieures à 100kHz. Ces fluctuations sont efficacement lissées (en $\frac{1}{\sqrt{N}}$) lorsque le nombre d'émetteurs N augmente. Les variations observées dans notre cas correspondent aux transitions abruptes associées au premier mode. Ces variations sont cohérentes avec la diminution du nombre d'émetteurs par rapport à la mesure de la Figure 5.6 effectuée en mode colonne.

5.1.3.3 Durée de vie

Nous n'avons pas eu le temps de conduire des mesures de durée de vie qui demandent des essais prolongés sur environ 1000 heures, temps d'utilisation estimé d'un spectromètre en orbite autour de Mars pendant une année martienne. Nous rappellerons simplement que les durées de vie visées pour les cathodes à micro-pointes équipant des écrans plats sont de 10000 heures, mais que le temps de cycle dans ces écrans est de 0.4%, donc typiquement 100 fois inférieur à ceux que nous visons.

On peut, pour finir, également mentionner des tests systématiques de durée de vie récemment menés au Rutherford Appleton Laboratory (Aplin et al., 2004), sur des cathodes à base de pointes en silicium, pour la neutralisation de satellites utilisant la propulsion ionique. La configuration utile comprend 20 cathodes de 765 pointes délivrant un courant maximum de 6mA, soit 7nA par pointe. Les meilleurs composants testés parviennent à des durées de vie de quelques centaines à un millier d'heures. L'analyse systématique des composants manifestant une dégradation au cours de l'émission, telle qu'une brusque augmentation du courant de grille, un flash, ou une décroissance progressive de l'émission, n'a pas permis d'identifier avec certitude l'origine de ces dégradations, qui peuvent provenir d'après les auteurs d'effets thermiques, du bombardement ionique, ou de court-circuits entre cathodes et grilles. Ceci montre bien les difficultés pratiques importantes que l'on rencontre dans ce type d'étude.

5.1.4 Spectre en énergie des électrons et interprétation

Les mesures de distributions d'énergie et d'angle des électrons ont été effectuées dans le mode pixel, décrit au paragaphe 5.1.2. La Figure 5.8 permet de visualiser la position des 5 pixels ((colonne=9,ligne=14), (9,15), (9,16), (17,15), (27,8)) dont les mesures sont décrites ici, et définit l'orientation des axes centraux de l'analyseur X_0 et Y_0 , dont l'intersection correspond au centre du composant, et à l'axe de symétrie Z_0 de l'analyseur.

Les mesures ont été effectuées en maintenant à 0V les contacts cathodiques des pixels émetteurs, et en appliquant aux grilles d'extraction des impulsions de potentiel Vg variables de 40 à 100 V. Nous présentons dans ce paragraphe quelques résultats représentatifs des mesures que nous avons effectuées sur les cathodes, et proposons un modèle empirique simple pour interpréter les aspects essentiels de ces observations.

Les Figures 5.9 et 5.10 illustrent les mesures du courant collecté réalisées avec le dispositif expérimental décrit au chapitre précédent. Nous avons utilisé ces courbes pour obtenir l'énergie moyenne E_m , et la largeur de la distribution en énergie σ_E des électrons émis, en supposant que l'enveloppe de leur spectre en énergie peut être représenté par une gaussienne, et en tenant compte du décalage induit par le travail de sortie du collecteur Φ_{coll} (4.85eV). En utilisant les mesures $I_{coll}(V_{coll})$, et le modèle numérique de l'expérience défini précédemment, on peut facilement remonter à E_m et σ_E .

La Figure 5.9 montre, pour différentes valeurs de la tension d'extraction Vgc, les caractéristiques $I_{coll}(V_{coll})$, c'est-à-dire la variation du courant crête collecté $I_{coll} = I_{crete}$ en fonction du potentiel retardateur V_{coll} appliqué au collecteur. Ce dernier est référencé par rapport aux potentiels des contacts cathodiques. Les différentes courbes font apparaître deux caractéristiques principales :

(i)-Le seuil du potentiel V_{coll} à partir duquel apparaît un courant mesurable est déplacé vers des



FIG. 5.8: Localisation de 5 pixels testés sur une matrice LETI. Les coordonnées (C,L) des pixels sont: (9,14), (9,15), (9,16), (17,15), (27,8).



FIG. 5.9: Evolution du courant crête collecté en fonction du potentiel du collecteur V_{coll} , dans le cas du pixel (17,15), pour des valeurs de la tension d'extraction Vgc fixée successivement à 40V(magenta), 60V(vert), 80V(cyan) et 100V(bleu). Les courbes rouges sont des ajustements des paramètres de la distribution modélisée, effectués à partir de la simulation de l'expérience.



FIG. 5.10: Evolution du courant crête collecté en fonction de la tension du collecteur, pour différents pixels, polarisés à une tension d'extraction de 60V:(17,15) 1-vert, (17,15) 2-noir, (9,14) 1-rouge, (9,14) 2-jaune, (27,8) cyan, (9,16) bleu, (9,15) magenta.

valeurs positives supérieures au travail de sortie du collecteur, de l'ordre de 4.85 V, contrairement à ce que l'on peut attendre du modèle simple présenté au chapitre 3. En outre, cet écart augmente avec le courant émis, c'est-à-dire avec les potentiels d'extraction Vgc, et on passe ainsi d'environ 0.8V pour Vgc=40V, à 15V pour Vgc=100V.

(ii)-La largeur à mi-hauteur de la distribution en énergie, mesurée par l'écart-type de la gaussienne, augmente avec le courant émis, de 2.3eV à Vgc=40V, à 8.9eV à Vgc=100V.

La Figure 5.10 montre les mesures obtenues pour différents pixels, et avec une tension d'extraction Vgc égale à 60V. Pour les pixels (17,15) et (9,14), nous fournissons deux séries de mesures réalisées à des moments différents espacés respectivement de 1 et 3 mois, et qui montrent une assez bonne reproductibilité. Les durées d'émission cumulées pour ces pixels pendant ces intervalles de temps sont respectivement de 164 et 104 heures. On constate de façon générale un bon accord entre la forme des courbes $I_{coll}(V_{coll})$ et celle du courant modélisé, si l'on se réfère aux simulations tenant compte des électrons secondaires, présentés sur la Figure 4.20. On remarquera en outre les écarts d'amplitude des courants importants entre pixels. Les courants minimum et maximum sont dans un rapport de 7, ce qui illustre une certaine inhomogénéité de l'émission que nous avons pu constater sur plusieurs cathodes, à cette échelle. De tels écarts peuvent résulter de plusieurs facteurs : pollution des pointes, dégradation locale de la résistance d'accès, nombre de pointes participant à l'émission dans chaque pixel, etc... Il nous est impossible de préciser l'importance relative de ces différents facteurs. En revanche on obtient que, quel que soit le courant émis, l'énergie moyenne et l'écart-type de la distribution en énergie varient faiblement et sont de 50.8 eV $\pm 2.2eV$ et 4.3 eV $\pm 0.5eV$.

Avant de présenter un modèle empirique simple pour interpréter ces observations, nous rappellerons

brièvement les travaux publiés par Baptist et al. (1997) et par Purcell et al. (1997), qui nous ont été utiles pour formuler notre interprétation. Les premiers auteurs ont étudié l'effet sur le courant émis de la couche résistive (décrite au paragraphe 3.1.1) entre les contacts cathodiques et les pointes. Le courant circulant dans cette couche en silicium induit une chute de potentiel, qui diminue la différence de potentiel effective Vgp = Vg - Vp entre les grilles d'extraction et les pointes. Cet effet de contreréaction empêche le courant émis par une pointe de croître jusqu'à des intensités trop importantes, ce qui permet de réduire les dégradations dues aux arcs qui peuvent se former entre les grilles et les pointes par suite de courts-circuits accidentels par exemple, et, d'une façon générale, améliore l'uniformité de l'émission entre les différentes pointes. En utilisant une géométrie de cathode simple avec 16 pointes disposées sur une couche résistive carrée entourée par un contact cathodique, Baptist et al. (1997) ont calculé la distribution des potentiels dans la couche résistive, ainsi que le potentiel réel au niveau des pointes, qui devient supérieur à celui du contact cathodique lorsqu'un courant est émis. Leur modèle permet ainsi de quantifier l'effet de la couche résistive sur le courant émis : l'effet de contre-réaction diminue le potentiel effectif d'extraction Vgp pour chaque pointe émettant un courant I_p (en première approximation $Vgp = Vgc - R_pI_p$ où R_p représente la résistance d'accès associée à la couche résistive traversée par le courant émis par la pointe), et donc le courant émis. En outre, la courbe de Fowler-Nordheim I(Vgp) présentée par ces auteurs diffère de la courbe théorique (relation 3.9 du chapitre 3), puisque le potentiel d'extraction Vgp dépend lui-même du courant émis, ce qui donne une relation du type:

$$Ip = a(Vgc - R_p I_p)^2 \exp\left(\frac{-b}{(Vgc - R_p I_p)}\right)$$
(5.1)

Le résultat global est un déplacement de la caractéristique I(Vgp) vers des potentiels plus forts, accompagné d'un élargissement de la distribution en énergie, en raison de la dispersion des résistances d'accès associées à chacune des pointes.

Purcell et al. (1997) ont publié des mesures détaillées de l'intensité et de la distribution en énergie des électrons émis par des émetteurs à effet de champ en utilisant, comme nous, des cathodes de type Spindt fabriquées par le LETI. Un aspect très intéressant de ces mesures est qu'elles ont été réalisées sans étuvage préalable, et pendant une durée longue qui a permis d'étudier l'évolution du fonctionnement pendant la phase de rodage et après celle-ci, lorsque l'émission est stabilisée.

Le principal phénomène observé par ces auteurs est la présence de plusieurs pics dans le spectre en énergie, qui évoluent au fur et à mesure du fonctionnement de la cathode, et qui dépendent également du niveau du potentiel d'extraction. Ainsi, même après la fin de la phase de rodage, Purcell et al. (1997) ont observé un élargissement de la distribution en énergie pouvant atteindre 10 à 30 eV, et, pour des potentiels d'extraction Vgc supérieurs à 65V, l'apparition sur le spectre de pics très instables et pratiquement impossibles à caractériser correctement, en raison de leur faible durée de vie. Pour finir, ces auteurs ont même poussé les conditions de l'expérience jusqu'à déclencher des "flashes" au niveau des composants : les mesures suivantes pour des potentiels $Vgc \leq 65V$ ont montré une diminution du courant émis d'un ordre de grandeur, et un spectre en énergie plus simple composé de deux pics.

Pour rendre compte de leurs observations, les auteurs ont proposé un modèle phénoménologique

fondé sur l'existence de nano-protubérances sur la surface conique des pointes. En raison de l'augmentation du facteur champ au niveau de ces protubérances, dont le rayon de courbure est très faible, les électrons sont émis de façon préférentielle au niveau de ces sites, à partir de bandes d'énergie caractéristiques de leurs matériaux constitutifs, dont les niveaux de Fermi diffèrent du niveau de Fermi du molybdène qui constitue la pointe. Ceci entraîne, pour les électrons émis, l'apparition de pics en énergie individuels dans le spectre, et un déplacement de ces pics vers des énergies plus faibles que celle des électrons émis de puis de niveau de Fermi de la pointe, accompagné par conséquent d'un étalement de la distribution. Pendant la période de rodage, les nanoprotubérances situées le long des flancs des pointes sont progressivement détruites et, seules demeurent actives celles qui sont situées vers l'apex. Ces dernières joueront un rôle principal dans l'émission une fois le rodage terminé.



FIG. 5.11: Structure d'une colonne de pointes intégrant un pixel. Un pixel est contitué de la juxtaposition de 20 de ces colonnes.

Ces deux ensembles d'observations nous ont conduits à proposer un modèle empirique pour interpréter nos résultats. La structure des cathodes que nous avons utilisées diffère de celle envisagée par Baptist et al. (1997): les pointes sont réparties suivant des colonnes individuelles séparées l'une de l'autre par des contacts cathodiques parallèles, comme on a pu le voir sur la Figure 3.3 du chapitre 3, et comme nous l'avons représenté sur le schéma 5.11.

Chaque pixel est constitué de 20 colonnes comportant chacune 88 pointes. En raison de la simplicité de cette disposition, il semble raisonnable de considérer que toutes les pointes sont connectées au contact cathodique du pixel à travers des éléments de la couche résistive qui ont une résistance identique. D'après Muller (communication personnelle) l'ordre de grandeur de cette résistance est de $300M\Omega$.

Dans la suite, nous considèrerons, conformément aux résultats de Constancias (1998), que le taux de pointes participant à l'émission dans un pixel est de 50%. Ce taux de pointes actives correspond à une résistance équivalente de $340k\Omega$ par pixel, et à une valeur moyenne de la chute de potentiel entre le contact cathodique et chaque pointe de 8.5V, pour un courant émis de $25\mu A$ par pixel, obtenu pour une tension d'extraction de 100V. Cependant, une des mesures que nous avons réalisées au cours des essais nous a conduits à bâtir un schéma électrique plus complet pour représenter de façon globale le fonctionnement des cathodes. En effet, les résistances d'isolement que nous avons mesurées entre les contacts cathodiques et les grilles sont relativement faibles (Figure 5.14), et impliquent donc, comme on va le voir, de prendre en compte des éléments résistifs supplémentaires.



FIG. 5.12: Structure résistive d'une unité émettrice.

La Figure 5.12 représente le schéma électrique associé à une pointe (p), avec sa grille d'extraction (g), et le contact cathodique (c) qui l'alimente. Pour des raisons de symétrie par rapport à l'axe de la pointe, cette structure est équivalente à la géométrie réelle qui comprends des conducteurs cathodiques et de grilles répartis de part et d'autre de la pointe. Lorsque nous transposerons au niveau d'un pixel nous ferons l'hypothèse légitime que toutes les résistances représentées sont mises en parallèle. R_1 est une résistance due à la couche résistive entre le contact cathodique et la pointe, qui possède une valeur de l'ordre de $300M\Omega$ comme nous l'avons indiqué auparavant. R₂ est la résistance de la couche de silice qui isole la couche résistive sur laquelle sont implantées les pointes, de la grille d'extraction. R_2 englobe la résistance volumique de la couche de silice, en principe très grande, et une résistance de fuite sur la surface que nous pensons être responsable, dans notre cas, des valeurs d'isolements relativement faibles constatées lors des mesures (Figure 5.14) et sur lesquelles nous reviendrons à la fin de ce paragraphe. Même dans de bonnes conditions opératoires (maintien de composants sous atmosphère contrôlée, ultra-vide, etc...) la présence d'hydrocarbures dans l'atmosphère résiduelle est inévitable en raison du dégazage des matériaux tels que les kapton ou le vespel utilisés pour certaines pièces et le câblage. Les surfaces des différents éléments de la cathode peuvent absorber ces composés. Le cracking par les électrons qui atteignent la couche de silice entraîne la formation de couches carbonées dont la conductivité peut être relativement importante. D'autre part, un dépôt d'ions carbonés formés à partir du gaz résiduel entre la surface du composant et le diaphragme de l'analyseur, ou bien à proximité immédiate de la surface de la cathode, peut également se produire. Pour compléter le schéma électrique de base, nous avons pris en compte deux autres éléments liés à la couche résistive et qui représentent (i) la liaison entre la pointe et la base de la couche de silice et (ii) la liaison entre le contact cathodique et la couche de silice. Les résistances de ces élements, qui dépendent comme R_1 des propriétés électriques de la couche résistive, peuvent donc s'écrire μR_1 et λR_1 . En raison de la géométrie du système on voit facilement que μ doit être petit, puisque la pointe est proche de la base de silice ($\mu \ll 1$), et que λ est de l'ordre de 1 (on considérera dans la suite un intervalle $0.5 \le \lambda \le 2$).

Enfin pour compléter ce schéma électrique, nous avons également tenu compte de la fraction du courant émis par les pointes, collectée par les grilles d'extraction, en introduisant un paramètre k. On note alors ki_e le courant effectivement émis par les pointes, i_e étant le courant que nous mesurons sur le diaphragme, et que nous avons qualifié jusqu'à présent de «courant émis», tel qu'il est vu de l'extérieur. Après la période de rodage, le courant intercepté par les grilles reste faible et, par conséquent, nous

formons l'hypothèse que k possède une valeur comprise entre 1 (aucun courant intercepté) et 1.5 (50% du courant intercepté).



FIG. 5.13: Schéma résistif d'une unité émettrice.

En écrivant les relations liant les courants et les tensions à partir du schéma de la Figure 5.13, on obtient :

$$\begin{cases}
Vgc = Vg - Vc = -R_2 i_2 - \lambda R_1 i_f \\
Vpc = Vp - Vc = -\mu R_1 i_1 - \lambda R_1 i_f = -R_1 (k i_e - i_1) \\
i_f = i_1 + i_2
\end{cases}$$
(5.2)

ce qui permet d'aboutir à l'expression suivante, reliant le courant i_e aux différences de tension entre pointes et grilles, et entre contacts cathodiques et grilles:

$$Vgp = Vg - Vp = \left(Vg - Vc\right)\left(1 - \frac{1}{A}\right) - k \times i_e \frac{B}{A}$$
(5.3)

où:

$$\begin{cases}
A = \left[1 + \mu + \left(1 + \frac{1+\mu}{\lambda}\right)\frac{R^2}{R^1}\right] \\
B = \left[\mu R 1 + R^2 \left(1 + \frac{\mu}{\lambda}\right)\right]
\end{cases} (5.4)$$

Comme indiqué précédemment, nous avons mesuré les résistances d'isolement Rgc entre les contacts cathodiques et les grilles d'extraction. Ces mesures ont été effectuées pour des valeurs de Vg et Vc telles qu'il n'y ait pas d'émission. Dans ce cas, $i_e = 0$, et d'après la Figure 5.13, la résistance Rgc est égale à :

$$Rgc = R2 + \frac{\lambda(1+\mu)}{1+\lambda+\mu}R1$$
(5.5)

La Figure 5.14 montre les variations de Rgc en fonction de la tension appliquée Vgc pour différents pixels. On remarquera son comportement fortement non linéaire, la résistance diminuant rapidement lorsque Vgc augmente entre 0 et 20 V et beaucoup plus lentement au-delà. Les mesures que nous avons pu faire ne sont pas suffisantes pour fournir une explication à ce comportement, mais il rappelle celui qui est observé dans le cas de couches résistives très inhomogènes où des taches de faible résistivité sont incluses dans une matrice plus fortement résistive. La conduction se fait alors par sauts entre taches presque jointives et augmente rapidement avec la tension appliquée. Si, comme nous pouvons le supposer, la résistance R_2 est due principalement à la présence de couches carbonées sur la surface de la silice, il est fortement probable que ce dépôt résistif soit très inhomogène et corresponde naturellement



FIG. 5.14: Evolution de la résistance d'isolement Rgc entre la grille et le contact cathodique pour différents pixels, en fonction de la tension d'extraction Vgc.

Vgc (V)	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Ie $(10^{-6}A)$	0	0	0	0.6	1.9	4.4	8.7	15.6	23.1

TAB. 5.1: Courant	i_e	émis p	par le	pixel	(17, 15)).
-------------------	-------	--------	--------	-------	----------	----

à une configuration en « taches ». Nos mesures montrent que nous pouvons représenter la variation de la résistance Rgc sous la forme :

$$R_{qc} = R_0 \cdot Vgc^{-\alpha} \tag{5.6}$$

où α prend des valeurs comprises entre 0.4 et 0.5 et R_0 varie de 10 à 30 M Ω . En ce qui concerne R_0 on remarquera d'assez fortes différences entre les pixels. On obtient donc une relation empirique donnant R_2 , en fonction des paramètres connus:

$$R_2 = R_0 \cdot Vgc^{-\alpha} - \frac{\lambda(1+\mu)}{1+\lambda+\mu}R_1 \tag{5.7}$$

En supposant, comme nous l'avons indiqué ci-dessus, que les différentes résistances se combinent en parallèle au niveau global d'un pixel, et en choisissant successivement les valeurs de R₁ telles que $R_1 = 170k\Omega$, $340k\Omega$, $680k\Omega$, nous avons effectué une étude paramétrique de l'influence sur la tension Vgp des paramètres λ, μ , et k, ceux-ci variant dans les intervalles respectifs [0.5-2], [0-0.5], et [1.1-1.5].

Etant donné les faibles dispersions des paramètres E_{moy} et σ_E obtenues pour les cas testés, qu'illustre la Figure 5.10, d'une part, et la faible sensibilité du modèle aux valeurs de R₀ dans la gamme choisie, d'autre part, nous avons représenté les résultats sur les figures 5.15(a), (b), et (c), dans le cas du pixel (17,15), pour lequel R₀ = 22.28M Ω et α = 0.47, dont le comportement est représentatif du comportement moyen d'un pixel fonctionnant de manière nominale.

Le courant émis i_e prends les valeurs que nous avons mesuré pour ce pixel, et sont données dans le tableau 5.1.

Chacune des figures comporte 4 jeux de 3 courbes correspondant à des valeurs typiques de λ , μ et k. λ varie entre 0.5 et 2, par pas de 0.5. Le jeu de courbes bleues correspond à $\mu = 0.2$, et k = 1.5. Le jeu de courbes rouges correspond à $\mu = 0.2$, et k = 0.2, et k = 0



FIG. 5.15: Influence des paramètres R1, μ , λ , et k sur la différence de potentiel Vgp entre la grille d'extraction et les pointes, en fonction de la tension Vgc. λ varie entre 0.5 et 2, par pas de 0.5. Le jeu de courbes bleues correspond à $\mu = 0.2$, et k = 1.5. Le jeu de courbes rouges correspond à $\mu = 0$, et k = 1.5. Le jeu de jaunes rouges correspond à $\mu = 0.2$, et k = 1.1. La courbe verte représente les valeurs de Vgp déduites des mesures de la Figure 5.12 (voir le texte pour l'explication des familles de courbes).

et k = 1.1. Sur ces figures, nous avons aussi tracé la courbe Vgp=f(Vgc) déduites des mesures de la Figure 5.9 pour le pixel (17,15), en supposant que l'énergie moyenne E_{moy} mesurée sur les électrons émis représente simplement la différence de potentiel Vgp=Vg-Vp.

On constate que:

- les courbes expérimentales Vgp=f(Vgc) sont d'une façon générale au-dessous des courbes modélisées,
- l'augmentation de λ réduit l'écart entre courbes expérimentales et courbes modélisées,
- l'augmentation de R₁ réduit l'écart entre courbes modélisées et courbes expérimentales. Il y a un donc un meilleur accord entre modèle et expérience si l'on diminue la proportion des pointes actives, ce qui est cohérent avec l'analyse menée dans Constancias (1998) que l'on a évoquée, sur le rôle inhibiteur de la couche résistive. Il faut d'autre part également inclure à la proportion de pointes inactives les pointes éventuellement dégradées lors de l'émission, par exemple, tel qu'on a pu le constater sur certains composants après leur fonctionnement à fort potentiel d'extraction avec un rapport cyclique élevé.

- les valeurs optimales de μ sont faibles, puisque augmenter μ de 0 à 0.2 augmente l'écart entre modèle et expérience. On remarque également que l'influence de μ sur Vgp reste faible (de l'ordre de 5% pour Vgc = 100V) lorsque R₁ est inférieur ou égal à 340k Ω .
- enfin, augmenter le courant intercepté par les grilles d'extraction en augmentant k de 1.1 à 1.5 permet de réduire l'écart entre modèle et expérience, mais a tendance à accroître la courbure de la courbe modélisée aux fortes valeurs de Vgc. Comme on l'a mentionné au paragraphe 5.1.2, le courant de fuite observé en mode colonne représente est en général une fraction de l'ordre de 10 à 15% du courant émis, ce qui est en particulier le cas du pixel (17,15).

On constate également que pour des valeurs de R_1 supérieures à $340k\Omega$ (par exemple $680k\Omega$ qui correspond à 25% de pointes participant à l'émission) la pente de la courbe modélisée devient notablement différente de celle des courbes expérimentales au-delà de 75V.



FIG. 5.16: Comparaison entre la tension d'extraction Vgp_{exp} déduite des mesures de distribution en énergie, et la tension d'extraction modélisée Vgp_{model} .

Au total les conclusions que nous pouvons tirer de ce modèle résistif sont les suivantes :

- pour éviter une trop grande différence entre les formes des courbes modélisées et des courbes expérimentales, la valeur la plus raisonnable de R₁ doit rester voisine de $340k\Omega$, ce qui correspond à 50% de pointes actives. Les valeurs $\lambda \sim 1.5^{\pm 0.5}$, $\mu \sim 0.1^{\pm 0.1}$, et $k \sim 1.1^{\pm 0.1}$ paraissent dans ces conditions de bonnes approximations.
- on constate, en utilisant les valeurs de ces paramètres, qu'il subsiste un écart important entre le modèle et les résultats expérimentaux que nous avons illustrés sur la Figure 5.16. Sur cette figure nous avons représenté, en fonction de la tension d'extraction Vgc, les valeurs de : la différence de potentiel entre pointes et contacts cathodiques Vpc déduite des mesures de la Figure 5.9,

représentées par les triangles jaunes et ajustés par un polynôme du second degré, noté Vpc_{exp} ; les valeurs de Vgp déduites de Vpc_{exp} (notées Vgp_{exp}), qui sont de 35.03V (pour Vgc=40V), 50.7V (pour Vgc=60V), 64.2V (pour Vgc=80V), et 75.4V (pour Vgc=100V); les valeurs de Vgp fourni par le modèle 5.3 (notées Vgp_{model}), avec les valeurs des paramètres indiquées ci-dessus; et enfin la différence ΔV entre Vgp_{exp} et Vgp_{model} , dont on constate qu'elle croît de 4V pour Vgc = 40V à 12V, pour Vgc = 100V.

Pour expliquer cet écart ΔV croissant en fonction de la tension d'extraction, nous nous appuyons sur les résultats de Purcell et al. (1997), et l'interprétation des spectres en énergie mesurés par ces auteurs par la présence de nano-protubérances. Les variations de ΔV que nous observons sont tout à fait comparables à la variation du décalage de l'énergie moyenne rapportée dans Purcell et al. (1997) (qui donnent également une estimation du décalage dû à la présence de la couche résistive à partir de leurs mesures). Nous pouvons également appliquer cette idée pour rendre compte de la variation de largeur de la distribution en énergie, représentée par l'écart type σ_E de la gaussienne ajustée sur les données. σ_E résulte de deux effets : d'une part de la dispersion des paramètres du modèle résistif entre les différents pixels, qui introduit une dispersion σ_{ER} des Vgp modélisés, et d'autre part, de la structure fine du spectre composée de pics multiples et décalés en énergie, dus à la présence des nano-protubérances sur les différentes pointes, induisant donc une dispersion sur l'énergie des électrons émis, notée σ_{EP} . Nous écrirons donc :

$$\sigma_E^2 = \sigma_{ER}^2 + \sigma_{EP}^2 \tag{5.8}$$

 σ_{ER} peut être évalué en différenciant l'expression (5.6) par rapport aux paramètres qui interviennent de façon significative, c'est-à-dire R_1 , λ , k, et R_2 , en prenant comme écart type pour chacun d'entre eux respectivement :

$$\sigma_{R_1} \sim 0.1R_1$$
 (d'après Constancias (1998) et Baptist et al. (1997))
 $\sigma_{R_2} \sim 0.3R_2$ (d'après les mesures fournies Figure 5.14, en éliminant les cas extrêmes)
 $\sigma_{\lambda} \sim 0.1\lambda$ (par analogie avec σ_{R_1})
 $\sigma_k \sim 0.1k$ (valeur raisonnable d'après les mesures effectuées)

On a alors:

$$\sigma_{ER}^2 = \left(\frac{\partial Vgp}{\partial R_1}\right)^2 \sigma_{R_1}^2 + \left(\frac{\partial Vgp}{\partial R_2}\right)^2 \sigma_{R_2}^2 + \left(\frac{\partial Vgp}{\partial R_\lambda}\right)^2 \sigma_{R_\lambda}^2 + \left(\frac{\partial Vgp}{\partial R_k}\right)^2 \sigma_{R_k}^2 \tag{5.9}$$

avec:

$$\frac{\partial Vgp}{\partial R_1} = -\frac{1}{\left[R_1(1+\mu) + R_2(1+\frac{1+\mu}{\lambda})\right]^2} \left[(1+\frac{1+\mu}{\lambda})R_2 \cdot Vgc + (5.10)\right]^2$$

$$\dots R_1 \left[\mu (1+\mu) R_1 + (1+\frac{1+\mu}{\lambda}) (R_1 (1+\frac{\mu}{\lambda}) + 2\mu R_2) \right] \cdot ki_e \right]$$
(5.11)

$$\frac{\partial Vgp}{\partial R_2} = \frac{R_1}{\left[R_1(1+\mu) + R_2(1+\frac{1+\mu}{\lambda})\right]^2} \left[(1+\frac{1+\mu}{\lambda}) \cdot Vgc - R_1 \cdot ki_e \right]$$
(5.12)

$$\frac{\partial Vgp}{\partial \lambda} = \frac{R_1 R_2}{\left[R_1(1+\mu) + R_2(1+\frac{1+\mu}{\lambda})\right]^2 \lambda^2} \left[-(1+\mu)Vgc + R_2\frac{1}{1+\mu} \cdot ki_e\right]$$
(5.13)

$$\frac{\partial Vgp}{\partial k} = -\frac{\mu R 1 + R2 \left(1 + \frac{\mu}{\lambda}\right)}{1 + \mu + \left(1 + \frac{1 + \mu}{\lambda}\right) \frac{R2}{R1}} \cdot ki_e$$
(5.14)

L'écart-type σ_{EP} dû aux nanoprotubérances peut être associé à la variation du facteur de champ à leur surface, dont la forte augmentation traduit l'émission d'électrons depuis des bandes d'énergies situées en profondeur dans le métal. Il peut être théoriquement évalué à partir de la loi de Fowler-Nordheim que nous rappelons ci-dessous, puisqu'il est proportionnel à la largeur à mi-hauteur de la distribution du courant en fonction de l'énergie :

$$\frac{dJ}{dE} \cdot \frac{1}{J_0} = \frac{\exp \epsilon/d}{d\left[1 + \exp \epsilon/k_B T\right]}$$
(5.15)

où k_B est la constante de Boltzmann, T est la température, J_0 est le courant pour T = 0K, $\epsilon = E - E_F$ la différence d'énergie par rapport à l'énergie de Fermi, et d une fonction du champ électrique appliqué $F(V.m^{-1})$ et du travail de sortie Φ (en eV) du matériau des pointes, telle que :

$$d = 0,93.10^{-10} \frac{F}{\sqrt{\Phi}} \tag{5.16}$$

Toutefois, il nous est difficile, pour ne pas dire impossible, de proposer des valeurs raisonnables de la bande d'énergie δE dans laquelle sont émis ces électrons ou des écarts $\delta\beta$ sur les facteurs de champ, puisque ces éléments sont liés à la nature et à la structure de nano-protubérances. Nous pouvons en revanche procéder empiriquement en évaluant σ_{EP} à partir de la relation 5.9 :

$$\sigma_{EP}^2 = \sigma_E^2 - \sigma_{ER}^2 \tag{5.17}$$

Les résultats finaux obtenus pour le pixel (17,15) pour différentes valeurs de Vgc sont indiqués dans le tableau 5.2:

La largeur à mi-hauteur de la ditribution de Fowler-Nordheim est reliée au paramètre d (voir par exemple Brenac et al. (1987)), les valeurs trouvées pour le paramètre σ_{EP} pourraient être utilisées pour estimer un facteur de champ β équivalent décrivant l'effet des nanoprotubérances.

La figure 5.17 donne un exemple des spectre en énergie des électrons émis déduits de nos mesures.

Vgc (V)	40	50	60	70	80	90	100
$Vgp_{exp} - Vgp_{model}$ (V)	0.76	1.41	2.41	3.97	6.19	9.33	13.49
$\Delta V (V)$	4.21	5.47	6.88	8.31	9.62	11.01	11.10
σ_{EP} (V)	0.94	1.43	1.80	2.26	2.57	2.69	2.62
σ_{ER} (V)	0.24	0.41	0.65	0.99	1.43	2.00	2.73
$d^2\sigma_{R_1}$ (V)	0.006	0.02	0.05	0.14	0.34	0.76	1.50
$d^2\sigma_{R_2}$ (V)	0.05	0.14	0.35	0.78	1.59	3.00	5.4
$d^2\sigma_\lambda$ (V)	0.002	0.005	0.014	0.036	0.084	0.18	0.36
$d^2\sigma_k$ (V)	0.0	0.0	0.001	0.007	0.026	0.080	0.200
E_{moy} (eV)	35.0	43.1	50.7	57.7	64.2	69.7	75.4
ΔE_{FWHM} (eV)	2.3	3.5	4.5	5.8	6.9	7.9	8.9

TAB. 5.2: Valeurs ajustées des paramètres décrivant l'émission du pixel (17,15). L'énergie moyenne et la dispersion en énergie du faisceau déduites des mesures sont notées respectivement E_{moy} et ΔE_{FWHM} . La notation $d^2\sigma_X$ correspond au terme $(\frac{\partial Vgp}{\partial X})^2\sigma_X^2$ de l'expression 5.9.



FIG. 5.17: Distributions associées au faisceau émis par le pixel (17,15), déduites de la modélisation de l'expérience.

5.1.5 Distribution angulaire des électrons

De même que pour les distributions en énergie, les mesures de distribution angulaire des électrons émis ont été réalisées en mode pixel. Les mesures présentées dans ce paragraphes ont été réalisées en fixant la tension d'extraction Vgc à +60V. Les contacts cathodiques des colonnes non actives (c'està-dire toutes, sauf celle comprenant le pixel émetteur, dont le contact cathodique est polarisé à 0V) sont polarisés à un potentiel de +50V. Une tension de +80V est appliquée sur le diaphragme d'entrée de l'analyseur en énergie.



FIG. 5.18: Disposition des axes de la cathode (X, Y), et des axes de l'analyseur (X_0, Y_0) , lors de la mesure de la distribution angulaire des électrons émis par un pixel.

Comme nous l'avons indiqué dans la description du dispositif expérimental, on obtient une image de la distribution angulaire des électrons en déplaçant le pixel émetteur par rapport aux axes X_0 et Y_0 dont l'intersection coïncide avec la position du trou d'entrée dans l'analyseur (voir Figures 5.8 et 5.18). Cependant, en raison des différents potentiels appliqués aux grilles d'extraction, qui entraîne une disymétrie de potentiels au niveau de la surface de la cathode, la distribution angulaire est déformée, et comme on va le voir, une modélisation de l'émission en fonction de l'angle est nécessaire pour remonter à la distribution réelle. La position du pixel émetteur par rapport aux axes du porte cathode est connue avec une incertitude de $\pm 100 \mu m$, et les déplacements du composant suivant X et Y sont connus avec une incertitude largement inférieure, de $\pm 5 \mu m$. Chaque mesure présentée dans les figures suivantes est une moyenne de 5 mesures individuelles, espacées par des intervalles d'une seconde, ce qui permet de réduire significativement les fluctuations, tout en évitant les erreurs induites par la dérive lente des courants. Un délai de 10s est nécessaire pour déplacer la cathode d'une position à la suivante, distante de 1mm au maximum (certaines mesures sont réalisées avec des pas de 0.5mm ou moins). Nous prenons par la suite comme définition des angles limites du faisceau émis, les angles correspondant à un courant collecté égal à 5% du courant maximum.

La Figure 5.19 montre pour le pixel (9, 15) une vue 3D des variations du courant mesuré sur le collecteur en fonction de la position du pixel dans le référentiel (X_0, Y_0) . Le courant moyen maximum est de l'ordre de 500pA (le courant crête de 5nA), le seuil de sensibilité de l'électronique de mesure étant de quelques pA.



FIG. 5.19: Exemple de profil 3D du courant moyen émis pour le pixel(9,15), avec Vgc = 60V, et Vd = 80V. Le rapport cyclique lors de la mesure est de 10%.

On constate que la distribution angulaire est sensiblement plus étroite parallèlement à l'axe Y que parallèlement à l'axe X. Ce point est examiné en détail dans les deux figures suivantes.



FIG. 5.20: Courants collectés normalisés, en fonction de la position de l'émetteur le long de l'axe X_0 , pour les pixels:(17,15) en vert, (9,14) en bleu, (27,8) en rouge, (9,16) en magenta, (9,15) en cyan. La courbe noire avec des étoiles représente le profil de courant issu de la simulation de l'expérience (détails dans le texte).

La Figure 5.20 représente pour l'ensemble des 5 pixels de la Figure 5.8, la variation du courant en fonction de la position du pixel, lors de déplacements s'effectuant parallèlement à l'axe X_0 (c'est-à-dire parallèlement aux lignes de la cathode, voir la disposition des axes sur la Figure 5.18).

Précisons que pour effectuter chaque mesure, les pixels sont positionnés sur l'axe X_0 (ou Y_0) de

l'analyseur, ce qui permet de décrire la distribution angulaire dans un plan à ϕ constant, et à θ variable.

Chaque courbe représente la moyenne des mesures réalisées au cours des trois allers-retours successifs parallèlement à l'axe X₀. Le pas ΔX est en générale de 1mm pour minimiser le temps total de mesure et l'influence des dérives du courant. Comme indiqué sur la figure, un des profil (celui du pixel (17,15)) a été réalisé avec des pas de $\Delta X = 0.5$ mm, et ne montre aucune différence significative. Le courant représenté est le courant normalisé par rapport à sa valeur maximale, ce qui permet de comparer des pixels avec des émissions différentes. La distribution angulaire dans un plan parallèle à la direction des lignes est semblable pour les différents pixels, et correspond à un angle limite d'émission de $62.2^{\circ} \pm 19\%$ et à une largeur à mi-hauteur de $53.3^{\circ} \pm 19\%$.



FIG. 5.21: Courants collectés normalisés, en fonction de la position de l'émetteur le long de l'axe Y_0 , pour les pixels:(17,15) en vert, (9,14) en bleu, (27,8) en rouge, (9,16) en magenta, (9,15) en cyan. La courbe noire avec des étoiles représente le profil de courant issu de la simulation de l'expérience (détails dans le texte).

La figure 5.21 représente des mesures similaires réalisées pour les mêmes pixels mais en suivant un déplacement parallèle à l'axe Y₀, c'est-à-dire parallèlement à la direction des colonnes. On constate que la distribution angulaire dans cette direction est plus étroite que dans le cas précédent, avec une largeur à la base de $44^{\circ} \pm 20\%$, et une largeur à mi-hauteur de $41^{\circ} \pm 20\%$.

Ces données permettent d'obtenir des profils moyens des distributions angulaires associées aux mesures le long des axes X_0 et Y_0 , représentés sur la Figure 5.22.

Comme on l'a déjà évoqué, l'émission en mode pixel suppose de polariser la ligne contenant le pixel à un potentiel positif, les autres lignes demeurant à 0V. Ceci a pour effet d'entraîner une focalisation du faisceau le long de l'axe Y, et une défocalisation le long de l'axe X. Cette situation peut être visualisée sur les Figures (a) et (b), qui représentent des coupes du faisceau émis modélisé, dans des plans parallèles aux axes X_0 et Y_0 , en supposant en cône d'émission axisymétrique.

Le courant total émis occupe un angle solide de demi-angle θ_{max} . Les angles d'émission θ (colatitude) et ϕ (azimuth) sont définis sur la figure 5.18. Dans ce système de coordonnées, nous adoptons



FIG. 5.22: Profils angulaires moyens déduits des profils mesurés le long des axes (X_0, Y_0) du système d'analyse. L'angle apparent correspond à l'angle géométrique formé entre la direction pixel-entrée de l'analyseur, et celle de son axe de symétrie.



FIG. 5.23: (a) Section dans le plan (X_0, Z_0) du faisceau émis modélisé dans SIMION3D, pour un pixel situé sur l'axe Z_0 .(b) Section dans le plan (Y_0, Z_0) du faisceau émis modélisé dans SIMION3D, pour un pixel situé sur l'axe Z_0 .

une loi simple pour la quantité de courant émise par l'élément de surface $dS = r \cdot \sin \theta \cdot d\phi \cdot r \cdot d\theta$, dans la direction (θ, ϕ) , telle que :

$$Ids = J_0 \cdot \cos(\alpha \cdot \theta) \cdot dS \tag{5.18}$$

où le paramètre α décrit la décroissance du courant émis avec l'angle d'émission θ , et où J_0 est la densité de courant émise pour un angle $\theta = 0$.

Le courant total Ip émis par l'ensemble est alors :

$$Ip = \int_0^{\theta_{max}} J_0 \cdot \cos(\alpha \cdot \theta) \cdot 2\pi r^2 \sin \theta \cdot d\theta$$
(5.19)

On remarquera que cette loi est beaucoup plus simple que les modèles d'émission monopointe que l'on a présentés au paragraphe 3.1.5, qui décrivent précisément la distribution angulaire du courant à l'échelle de la pointe. Elle permet toutefois de reproduire la décroissance angulaire du courant de façon réaliste, tout en limitant le nombre de paramètres à ajuster au seul paramètre α . On peut donc écrire :

$$Ip = 2\pi d^2 J_0 \int_0^{\frac{\pi}{2\alpha}} \cos(\alpha \cdot \theta) \cdot \frac{\sin \theta}{\cos^2 \theta} \cdot d\theta$$
(5.20)

où d est la distance séparant la surface de la cathode au diaphragme. Cette formulation nous permet d'introduire la distribution angulaire du courant dans le modèle de l'expérience.

Ainsi, l'ajustement du paramètre α réalisé à partir de la simulation de l'expérience nous permet de remonter simplement à la dispersion angulaire du faisceau.

L'analyse des trajectoires électroniques révèle que quelques électrons sont réfléchis (Figure (a)), et retournent vers la cathode et la couche isolante en silice (le rapport de l'aire émissive sur l'aire de la silice est en effet de l'ordre de 15%), qu'ils sont susceptibles de charger (en réalité le retour d'électrons vers la silice est plutôt bénéfique puisqu'il permet de décharger cette dernière des charges positives éventuellement accumulées en raison du champ accélérateur présent en sortie des grille).

Sur les Figures 5.20 et 5.21, nous avons reporté en traits noirs les profils correspondant à la simulation des mesures lors des déplacements d'un pixel suivant les axes X_0 et Y_0 , à partir d'un cône d'émission idéal modélisé par la loi précédemment décrite. Dans ce cas le demi-angle du cône d'émission est fixé à 45°, et on observe un bon accord avec les profils mesurés dans le cas du pixel (27,8). La disymétrie de potentiels au niveau de la surface du composant permet donc d'expliquer globalement l'asymétrie des profils mesurés. En revanche, une modélisation plus fine est nécessaire si l'on souhaite comprendre les faibles écarts demeurant entre ces profils. En particulier, malgré le nombre important de pointes participant à l'émission, des facteurs de perturbation de la symétrie du cône d'émission sont fortement probables. Sur l'ensemble des échantillons testés, l'angle moyen de la distribution angulaire est estimé à 42° ± 20%, ce qui donne une bonne indication de la dispersion angulaire réelle du faisceau. La valeur trouvée est par ailleurs comparable, quoique légèrement supérieure, aux mesures de distribution angulaire spubliées par Purcell et al. (1997) et Constancias (1998). En effet la largeur totale de la distribution angulaire est de 80° pour les premiers auteurs et de 56° pour les second.

5.2 Cathodes à Nanotubes de carbone

5.2.1 Caractéristique courant-tension

La mise en œuvre des cathodes testées est décrite au paragraphe 3.3.2 du chapitre 3.

1. Echantillon LETI: Les caractéristiques de l'échantillon ont été mesurées par le LETI (en mars 2005) avant intégration dans notre dispositif. Au cours de ces tests le composant était monté à 1 mm d'une anode polarisée à 1kV, alimenté par des impulsions de tension de $64\mu s$, avec un rapport cyclique de 0.4%. Le courant moyen relevé à l'anode était de $36\mu A$ à 100V ($25\mu A$ à 91V), avec un courant de fuite de 1.2mA. Le courant crête total que l'on peut attendre à 100 V est donc de l'ordre de 9mA, pour une surface émettrice de l'ordre de $1cm^2$.

Le premier test d'émission de cet échantillon réalisé au CETP a été effectué **en continu**, en raison de tests parallèles associés à l'électronique de commande, en augmentant progressivement la tension d'extraction Vgc jusqu'à 75V (l'anneau de garde de la cathode étant relié à la masse), l'anode faisant face au composant (le diaphragme) étant polarisée à Vd=180V. A ce niveau de tension le courant mesuré sur cette anode $I_d = 5\mu A$, quoique très faible, a montré une bonne stabilité. La tension d'extraction a ensuite de nouveau été augmentée jusqu'à Vgc=100V, et un courant crête de $60\mu A$ a été enregistré. Le niveau de courant relevé est donc extrêmement faible comparé aux valeurs annoncées par le LETI.

Un montage simple (Figure 5.24) nous a permis par ailleurs de vérifier la présence d'un courant émis en mode pulsé (T=10ms, duty=10%):



FIG. 5.24: Montage simple employé pour vérifier la présence d'un courant en mode pulsé. Le schéma montre les points de raccordement des sondes de l'oscilloscope.

La Figure 5.25 montre les courants mesurées à l'oscilloscope, avec $Rc = 500\Omega$, $Rg = 1k\Omega$, et $Rd = 1M\Omega$. Dans ce cas Vd=200V, le potentiel de grilles Vg est fixé à 100V, et le potentiel du contact cathodique Vc est pulsé entre 100V et 0V. Pour Vgc=85V, le courant Id collecté est de l'ordre de $20\mu A \pm 0.1\mu A$, et on obtient simultanément un courant de cathode Ic = -12.8mA±0.8mA, et un courant de grille Ig=10mA±0.4mA. Une estimation du courant émis

donne Ie = Ic-Ig = 2.8mA, la précision de la mesure étant quasiment du même ordre. Une possibilité est donc que le courant émis ne soit que très peu collecté. Cette hypothèse a toutefois été réfutée car les variations du courant mesurées ne sont pas significatives lorsque la tension de polarisation de l'anode collectrice est augmentée jusqu'à 400V.



FIG. 5.25: Courbes mesurées à partir du montage de la Figure 5.24. Elles donnent un courant collecté par le diaphragme $Id = 20\mu A$, collecté par les grilles Ic = 12.8mA, et Ic = 12.8mA.

Considérant la présence d'un courant collecté, malgré le défaut de fonctionnement observé, la caractéristique courant-tension a tout de même été relevée (Figure 5.26) avec une anode polarisée à Vd=180V, une durée de pulse de 1ms, et un rapport cyclique de 10%.



FIG. 5.26: Caractéristique courant-tension de l'échantillon du LETI. Le courant mesuré atteint $58\mu A$, pour Vgc=100V.

Sur cette figure, Vgc apparent désigne la différence entre la tension de sortie de l'alimentation des grilles et la tension de sortie de l'alimentation de la cathode. La différence de potentiel réellement

appliquée entre les grilles et les tubes dépend du courant de fuite. A 100V ce courant, mesuré à la base de la cathode aux bornes de $Rc = 500\Omega$, était de l'ordre de 10mA (courant crête). La tension Vgc était alors de 95V (pas de résistance côté grilles), mais la différence de potentiel réelle entre les grilles et les tubes n'est pas connue car nous ignorons la contribution de la couche résistive du composant.

Le montage que nous utilisons diffère sensiblement de celui employé par le LETI, où une anode placée à 1mm et polarisée à 1kV recueille tout le courant émis. Le courant de fuite mesuré à 100V au CETP est 10 fois plus grand que la valeur donnée par le LETI. Les hypothèses permettant d'expliquer le faible courant collecté sont les suivantes :

- notre montage ne permet pas de reproduire les conditions d'extraction et/ou de collections des électrons (anode trop éloignée, champ extracteur trop faible).
- la polarisation des pistes des grilles n'est pas uniforme en raison d'un défaut dans le contact mécanique. Ce point a été testé avant la mise sous vide, mais la grande fragilité des pistes n'a pas permis de réaliser la mesure avec une fiabilité suffisante. Toutefois la trace du faisceau émis est une surface étendue (cf. paragraphe 5.2.3), ce qui indique que plus d'une ligne a dû émettre. En outre la résistance du composant mesurée à 20V (le premier jour) semble être du bon ordre de grandeur, par rapport aux données du LETI.
- la structure résistive de la cathode est dégradée, et la couche isolante ne joue plus son rôle. Ceci étant, entre la première et la dernière mesure, le niveau de courant collecté au diaphragme pour Vgc=75V (notre référence) n'a pas changé significativement (de l'ordre de $5\mu A$ à 20% près), bien qu'à la différence des premières utilisations, une décroissance lente apparaisse à la fin du cycle de tests une fois le niveau de courant établi.

En dernier lieu nous avons relevé l'évolution de la résistance du composant (R1+R2 du schéma de la Figure 5.27) avant et après la séquence de mesure effectuée au CETP :

- avant la première mesure le $04/07/2005: 300k\Omega$ pour Vgc=20V
- après la dernière mesure le $11/07/2005: 66k\Omega$ pour Vgc=20V



FIG. 5.27: Schéma du montage de mesure de l'isolation de la cathode.

Cette résistance, bien que plus faible en fin de cycle, ne laisse pas présager de court-circuit entre grilles et colonnes.

2. Echantillon TRT:

Contrairement aux cathodes développées par le LETI, la structure de cette cathode n'est pas intégrée. Comme on l'a déjà évoqué, la grille d'extraction est maintenue à l'aide d'une entretoise en silice à une distance de $100\mu m$ des tubes. Son potentiel doit alors être porté à environ 1000Vpour initier l'émission. Ce montage présente l'avantage de permettre un fonctionnement du composant en continu, en éliminant les risque de court-circuit entre la grille et les tubes, et en limitant les risques d'accumulation de charges dans la résistance d'isolement entre le substrat et la grille, celle-ci étant en contact avec l'électrode de grille sur toute sa surface. De plus le faisceau émis, fortement focalisé, est restreint à une surface centrée et faible par rapport au diamètre de l'ouverture dans la silice isolante. Le montage est également simple : l'anode collectrice est polarisée à 2000V, les tubes étant connectés à la masse, et la grille d'extraction est reliée à un générateur de tension variable entre 0 et 2000V. La caractéristique courant-tension que nous avons relevée *en continu* est présentée sur la Figure 5.28. En raison de la très faible transparence



FIG. 5.28: Caractéristique courant-tension de l'échantillon de Thales, mesurée en continu. Le courant émis par les tubes (en jaune) atteint $830\mu A$ pour Vgc = 1750V lors de cette mesure, le courant collecté par le diaphragme (en bleu) est alors de $80\mu A$.

de la grille d'extraction, le courant reçu par le diaphragme est de l'ordre de 10% du courant émis. Celui-ci atteint environ 1mA à 2000V, pour une surface émissive de $0.5 \times 0.5 mm^2$ (soit une densité de $400mA.cm^{-2}$). Le fonctionnement de cet échantillon étant nominal, nous avons pu suivre l'évolution du courant émis sur une durée de 60h (cf. Figure 3.22 du chapitre 3), pendant laquelle les variations enregistrées pour Vgc=1450V ont été inférieures à 10% de la valeur moyenne du courant émis ($83\mu A$).

Nous devons enfin souligner que les essais présentés ici sont bien sûr très préliminaires. En effet nous ne disposions que d'un seul échantillon de chaque type, et la mise en œuvre des deux ensembles nécessitait dans chaque cas d'effectuer des tests de l'électronique de commande et d'acquisition, qui dans le cas du LETI peuvent être à l'origine, sans certitude aucune, du comportement anormal observé.



5.2.2 Spectres en énergie des électrons

FIG. 5.29: Evolution de courant collecté lors de la mesure par potentiel retardateur sur l'échantillon du LETI, lorsque la tension d'extraction est fixée à Vgc=75V (graphique de gauche) et Vgc=95V(graphique de droite). On observe ici des dispersions énergétiques plus étroites que dans le cas des micropointes. Ces mesures restent toutefois à réitérer sur un composant fonctionnement de manière nominale.

- Echantillon LETI:

Suite au comportement anormal de ce composant pendant les essais, des tests de l'intégrité de la cathode ont été effectués au LETI. Ces tests ont révélé l'absence d'un court-circuit franc entre les lignes et les colonnes, ce que nous avions pu constater lors de nos mesures, ainsi que l'absence de détérioration de la couche de silicium, mais la présence anormale de contacts entre des plots de tubes et les grilles observés au MEB (Muller, communication personnelle). Ces observations expliquent donc que la majorité du courant émis passe directement dans les grilles. La structure résistive ne semblant pas atteinte, il reste toutefois possible que la faible quantité de courant émise soit représentative du courant extrait par effet de champ depuis les tubes. L'origine de ces courts-circuits n'a pas pu être déterminée. On peut remarquer que si l'émission continue était responsable de la détérioration observée, le niveau de courant aurait dû être beaucoup plus élevé au début, puis décroître assez rapidement dans le temps. Or, le niveau de courant moyen que nous avons relevé est resté constant au cours de la période d'essai.

Nous présentons donc ici quelques mesures de distribution en énergie des électrons émis que nous avons pu effectuer sur ce composant. Pour être totalement validées, ces mesures devront bien sûr être réitérées sur de nouveaux échantillons. Le graphique de droite de la Figure 5.29 montre pour Vgc=95V (rapport cyclique de 10%, durée de pulse de 1ms) la superposition de deux tracés des courants collectés en fonction du potentiel du collecteur, lorsque celui-ci varie par pas de 1V (courbe verte) et 100mV (courbe rouge). Le graphique de gauche montre la mesure effectuée pour Vgc=75V (rapport cyclique de 20%, durée de pulse de 1ms). Le courant mesuré est la somme des

courants collectés sur le collecteur central et sur le collecteur hémisphérique (polarisés au même potentiel Vcoll). Pour la mesure à Vgc=75V, le diaphragme est polarisé à Vd=95V. Pour la mesure à Vgc=95V, il est polarisé à Vd=115V. Chaque courbe est une moyenne de 3 balayages successifs du potentiel du collecteur. Lors d'un balayage chaque point est une moyenne de 4 mesures espacées de 0.5s. Les barres d'erreur tiennent compte des fluctuations temporelles du faisceau émis par l'échantillon, ainsi que du bruit mesure (de l'ordre 10% de la valeur moyenne sur la gamme 10pA-1nA (mesure à 75V), et de 5% de la valeur moyenne sur la gamme 100pA-100nA (mesure à 95V)).

Dans le cas où Vgc=75V, les électrons sont collectés pratiquement jusqu'à Vcoll= Φ_{coll} (travail de sortie du collecteur, de l'ordre de 4.85eV). On distingue un saut très raide entre 4.7 et 6.5 V, puis plus lent jusqu'à 10.3V, indiquant peut-être la présence d'un pic principal peu dispersé (~ 1eV) suivi d'un pic secondaire (~ 2eV), tels qu'on peut les estimer en utilisant un modèle de dispersion gaussien.

Dans le cas où Vgc=95V, les électrons sont collectés jusqu'à Vcoll=7V. La présence d'une couche résistive peut expliquer ce décalage, de l'ordre de 2.5V. Le saut se produit entre 7 et 11.5V, avec une grande homogénéité. L'étalement correspondant indique une dispersion très inférieure à 3eV, si l'on prend en compte l'étendue importante de la source, non réduite à un pixel dans ce cas. On peut noter que le décalage dû à la présence de la couche résistive est du même ordre que celui induit par la résistance Rc à 95V lors de la mesure de la caractéristique courant tension le 11/07/05 de la Figure 5.26. Il faut remarquer que la surface très étendue de la source ne permet pas de bénéficier de la résolution en énergie optimale, compte tenu des angles élevés des trajectoires avec la normale à la surface d'entrée de l'analyseur. Idéalement une source d'étendue équivalente à la surface d'un pixel serait nécessaire pour affiner ces mesures. Cependant nous avons obtenu une première observation intéressante: pour des tensions d'extraction similaires, la dispersion observée pour les nanotubes est plus étroite d'un facteur 4 à 5 par rapport à celle des micropointes en Molybdène. Une partie de cette différence peut provenir de la diminution du courant émis, en raison de la tension réduite entre grilles et certains plots de tubes pour lesquels les anomalies ont été observées. Dans des conditions nominales de fonctionnement ont peut s'attendre à une dispersion accrue de l'énergie des électrons en raison la chute de potentiel dans la couche résistive. Rappelons toutefois que pour un courant équivalent à celui émis par les tubes à 75V, obtenu à partir d'un pixel d'une cathode à micropointes pour une tension d'extraction proche de 80V, la dispersion énergétique que nous avons otbenus était de l'ordre de 6.9eV. Si on considère que des sources de dispersion énergétique des électrons telles que les nanoprotubérances n'existent pas dans le cas des tubes, et que l'on prends en compte la perte de résolution de l'analyseur en raison de la surface émettrice étendue comparée à la surface d'un pixel, il apparaît de toute façon un gain très significatif sur la largeur de la distribution en énergie du faisceau.



FIG. 5.30: Evolution de courant collecté lors de la mesure par potentiel retardateur sur l'échantillon de TRT, lorsque la tension d'extraction est fixée à Vgc=1450V.

La Figure 5.30 montre la courbe de courant obtenue lors du test de l'échantillon de TRT. Dans ce cas la configuration des potentiels de mesure est très différente : la grille d'extraction placée à $100\mu m$ des nanotubes est polarisée à 1450V, le faisceau est accéléré vers le diaphragme polarisé à 2000V, et les anneaux sont fixés au même potentiel (les équipotentielles dans l'analyseur sont donc très déformées pour des angles supérieurs à environ 30°). L'étendue du saut de courant, entre 6.5V et 11V, est sensiblement équivalente à celle observée dans le cas des tubes du LETI pour Vgc=95V, et laisse de plus apparaître quelques paliers, dont un notamment assez visible à 9.2V. La transparence de grille étant de l'ordre de 10%, et son épaisseur de $100\mu m$, les électrons provenant des tubes et parvenant au collecteur auront subi des réflexions multiples à l'intérieur de la grille et une proportion d'électrons secondaires élastiques, accélérée vers le diaphragme, est susceptible de contaminer le spectre. Les électrons secondaires vrais ne pourraient être mis en évidence qu'à un potentiel de collecteur de l'ordre de 500V. Cela étant, et en tenant compte de la perte possible en résolution de l'analyseur due à la désactivation du système d'anneaux, on peut fixer une limite supérieure de 2eV à la distribution d'énergie des électrons. On s'attend toutefois à une distribution plus étroite, les tubes étant reliés au substrat sans l'intermédiaire d'une couche résistive. Le passage à travers la grille est peut-être responsable d'une telle dispersion. L'origine du décalage du saut de courant également observé, de l'ordre de 2V, n'a pas été identifiée, mais reste sans importance pour le fonctionnement global du composant. Ce second essais sur des cathodes à nano-tubes confirme donc le premier et montre que ces composants doivent fournir des électrons avec des distributions beaucoup plus fines en énergie, ce qui peut être avantageux pour la réalisation des sources et des optiques de focalisation.

5.2.3 Distribution angulaire des électrons

- Echantillon LETI: Pour des raisons pratiques, le positionnement de la cathode sur son support est tel que les diagonales de la zone émissive sont colinéaires aux axes du déplacement, et donc que les colonnes de tubes forment un angle de 45° avec les axes X₀ et Y₀. On s'attend donc à ce que le profil de courant mesuré soit semblable suivant ces deux axes, ce qui est le cas des



FIG. 5.31: Profils de courants relevés, lors de déplacements des cathodes à nanotubes le long des axes X_0 et Y_0 . La figure de gauche représente les mesures effectuées sur le composant du LETI, tandis que la figure de droite représente le cas de l'échantillon fourni par TRT.

mesures présentées sur la Figure 5.31 (graphique de gauche), réalisées avec un pas de déplacement de 1mm. Sur ces courbes on distingue un plateau central d'environ 7 mm de large, puis une décroissance du courant, plus ou moins forte suivant l'axe, dont l'étalement varie entre 3 mm (suivant X et Y) dans le sens positif, 7 mm(suivant Y) et 11 mm (suivant X) dans le sens négatif. La tâche formée par le faisceau sur le diaphragme est donc fortement disymétrique. Les mesures révèlent également une relative uniformité de l'émission vers le plateau central, avec des variations de l'ordre de 25%, pouvant provenir des différences d'intensité émise entre des parties endommagées et saines, des variations temporelles du flux incident entre deux positions de mesures (les déplacements sont effectués manuellement, et les mesures ne sont pas corrigées de cet effet), et/ou d'une émission monocolonne. L'étendue de la tâche centrale semble toutefois indiquer que plus d'une colonne émet, puisque la largeur de ces dernières est d'environ $350\mu m$. Dans cette configuration, étant donné les incertitudes sur le fonctionnement du composant, il n'est pas possible d'estimer correctement la dispersion angulaire du faisceau émis par la cathode.

- Echantillon TRT : Le pas de déplacement varie entre 0.05mm et 0.5mm pour cette mesure, l'étendue de la surface émettrice étant de $0.25mm^2$, et le diamètre de la grille d'extraction étant de 5mm. La Figure 5.31 montre un profil très étroit suivant Y, avec un maximum centré en Y=-0.7mm. L'étendue de la base à 10% du courant maximum est de l'ordre de 1mm, ce qui indique un angle moyen de 11.3°. Il faut rappeler qu'au cours de cette mesure la tension d'extraction est de 1450V et qu'en outre les électrons sont accélérés de 550V supplémentaires entre la grille et le diaphragme. Il n'est donc pas possible de comparer directement ces chiffres avec ceux obtenus pour les micropointes, puisque le faisceau émis est focalisé. Suivant l'axe X₀ on distingue deux pics, un principal situé en X=+1mm et un secondaire en X=-1mm. La symétrie de la source ne laissait pas présager une telle forme de faisceau a priori. Cependant comme on l'a vu, la grille est très peu transparente, et les électrons subissant des réflexions multiples peuvent en sortir avec des angles importants. De plus, si une partie du faisceau émis par les tubes se trouve en bordure de grille (dans le cas d'un léger défaut de centrage), il est possible que le faisceau principal soit scindé en sous faisceaux responsables des pics observés. Là encore, une étude plus poussée et des mesures complémentaires sont nécessaires pour éclaircir ces points. Toutefois, étant donné la géométrie du système, la dispersion angulaire maximale suivant X peut être estimée à 30° , dans ces conditions de potentiels.

En résumé, dans cette partie, nous avons :

- décrit les caractéristiques principales des émetteurs à effet de champ basés sur des micropointes en Molybdène ou sur des nanotubes de carbone,
- décrit la conception et la réalisation d'un analyseur d'énergie hémisphérique à potentiel retardateur permettant de caractériser ces composants,
- déterminé les caractéristiques de cet analyseur au moyen de la simulation numérique,
- décrit la mise en œuvre et les essais en émission que nous avons effectués sur les composants,

ce qui nous a permis:

- de comparer les niveaux de courant émis, les tensions d'extraction nécessaires, et les modes de fonctionnement possibles pour les différents types de cathodes ($25mA.cm^{-2}$ sur 1 cm⁻² à 100V en pulsé pour les micropointes du LETI, $9mA.cm^{-2}$ (test constructeur) sur 1 cm⁻² à 100V en pulsé pour les nanotubes du LETI, $400mA.cm^{-2}$ sur 0.0025 cm⁻² à 2000V en pulsé/continu pour les nanotubes de TRT,
- de mesurer les distributions énergétiques et angulaires des électrons émis par les cathodes à micropointes du LETI,
- de proposer un modèle simple permettant d'interpréter les mesures que nous avons effectuées,
- d'effectuer quelques mesures préliminaires permettant d'apprécier les performances que l'on peut attendre des cathodes à nanotubes de carbone. Ces mesures nous ont permis de constater la relative facilité de mise en œuvre des cathodes à nanotubes (comparée à celle des cathodes à micropointes), et la possibilité de fonctionnement en continu qu'elle permettent dans l'une des configurations testées. Les mesures effectuées semblent également montrer des dispersions énergétiques plus étroites que dans le cas des cathodes à micropointes.

BIBLIOGRAPHIE

- Aplin, K. L., C. Collingwood, and B. Kent, 2004: Reliability tests of gated silicon field emitters for use in space. J. Phys. D.: Appl. Phys., 37, 2009–2017.
- Baptist, R., L. Bachelet, and C. Constancias, 1997: Microtips and resistive sheet: A theoritical description of the emissive properties of the system. J. Vac. Sci. Techno. B, 15(2).
- Benenson, W., J. Harris, H. Stocker, and H. Lutz, 2002: Handbook of Physics. Springer.
- Bergmann, T., T. P. Martin, and H. Schaber, 1989: High-resolution time-of-flight mass spectrometers:
 Part I. Effects of field distortions in the vicinity of wire meshes. *Review of Scientific Instruments*, 60, 347–349.
- Brenac, A., R. Baptist, G. Chauvet, and R. Meyer, 1987: Caractéristiques énergétiques de cathodes à micropointes à émission de champ. *Revue Phys. Appl.*, 22, 1819–1834.
- Constancias, C., 1998: Emission d'Electrons à partir de Micropointes pour Ecrans Plats: Simulation, Caractérisation et Confrontations Experimentales. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier.
- Fonzar Pintão, C. A. and R. Hessel, 2000: Total secondary-electron yield of metals measured by a dynamic method. *Journal of Applied Physics*, 88, 478–482.
- Furman, M. A. and M. T. Pivi, 2002: Probabilistic model for the simulation of secondary electron emission. *Physical Review Special Topics Accelerators and Beams*, 5(12), p 124404.
- Henderson, J. E. and R. E. Badgley, 1931: Experimental Measurement of the Total-Energy Distribution of Field-Emitted Electrons. *Phys. Review*, 38, 590.
- McCarson, B. L., R. Schlesser, and Z. Sitar, 1998: Field emission energy distribution analysis of cubic-BN-coated Mo emitters: Nonlinear behavior. *Journal of Applied Physics*, 84(6), 3382–3385.
- Miyamoto, N., H. Adachi, H. Nakane, and K. Yamane, 2003: Emission stability of field emitter array observed by an emission microscope. J. Vac. Sci. Techno. B, **21**(1), 436–439.

- Purcell, S. T., Vu Thien Binh, and R. Baptist, 1997: Nanoprotrusion model for field emission from integrated microtips. J. Vac. Sci. Techno. B, 15(5), 1666–1677.
- Reuss, R. H. and B. R. Chalamala, 2003: Gas induced current decay of molybdenum field emiter arrays. J. Vac. Sci. Techno. B, 21(4), 1187–1202.
- Schlesser, R., 1997: Energy distribution of field emitted electrons from diamond coated molybdenum tips. Appl. Phys. Lett., 70(12), 33–35.
- Schwoebel, P. R. and C. A. Spindt, 1993: Field-emitter array performance enhancement using hydrigen glow discharges. Appl. Phys. Lett., 63(1), 33–35.
- Simpson, J. A., 1961: Design of retarding field analyzers. Rev. Sc. Inst., 32(12), 1283–1293.
- Spindt, C. A., I. Brodie, L. Humphrey, and E. R. Westerberg, 1976: Physical properties of thin-film field emission cathodes with molybdenum cones. J. Appl. Phys., 47(12), 5248–5263.
- Temple, D., 1999: Recent progress in field emitter array development for high performance applications. Mat. Sicence and Eng., R24, 185–239.
- Young, R. D. and E. W. Müller, 1959: Experimental Measurement of the Total-Energy Distribution of Field-Emitted Electrons. *Phys. Rev.*, **113**(1), 115–120.

Troisième partie

Applications des cathodes froides en spectrométrie de masse - Mesure de la composante suprathermique de l'exosphère martienne
Je suis sûr que l'avenir nous apportera de nouveaux succès dans la conquête du ciel et de l'espace. Pour ce, que chacun de nous fasse ce qu'il est possible, et même ce qui paraît parfois impossible. Iouri Alekseïevitch GAGARINE

Nous présentons, dans cette dernière partie, l'application des sources d'électrons basées sur l'effet de champ à deux spectromètres destinés à des expériences spatiales. Le premier exemple est celui de la source d'ionisation classique d'un spectromètre de masse, dont l'objectif est la mesure de la composition isotopique des gaz rares dans l'atmosphère de Mars. Le second exemple est une étude de conception d'un spectromètre original de très grande sensibilité, destiné à la mesure des neutres chauds dans la couronne martienne. Dans ce dernier cas, nous utilisons conjointement les résultats de la modélisation de la couronne de la première partie, et les résultats de la caractérisation des émetteurs d'électrons de la seconde partie, afin de déterminer les spécifications du spectromètre, ses performances, et de fournir un aperçu des observations principales que l'on peut attendre de la mesure des neutres chauds dans la couronne de Mars.

CHAPITRE 6.

_Etude d'une source d'ionisation pour un spectromètre de masse classique : l'expérience PALOMA

L'expérience PALOMA a été proposée initialement par un groupement de laboratoires (SA, MA-GIE, GIS, et CETP), pour mesurer les abondances élémentaires et les rapports isotopiques des gaz de l'atmosphère de Mars. Les gaz rares, notamment le néon, l'argon, et le krypton, chimiquement inertes, sont des traceurs qui permettent de mieux contraindre l'évolution à long terme de l'atmosphère, et son érosion au cours des âges géologiques, en particulier sous l'influence des processus non thermiques qui ont été étudiés dans la première partie.

En particulier, le rapport des isotopes ${}^{36}Ar$ et ${}^{38}Ar$ de l'argon présente l'avantage d'être indépendant des sources radiogéniques, et l'isotope ${}^{40}Ar$, issu de la décomposition radioactive du potassium ${}^{40}K$ contenu dans la croûte, fournit à la fois des informations sur le taux de dégazage (Chassefière and Leblanc, 2004), et sur l'efficacité des processus d'échappement qui entraînent un fractionnement isotopique (Chassefière et al., 2005). A ce jour, les données Viking (Owen et al., 1977) constituent les seules références de rapports isotopiques mesurés à la surface de Mars, les seules autres données étant celles obtenues à partir des météorites SNC.

Les principaux objectifs scientifiques de l'expérience PALOMA sont :

- de mieux contraindre les processus de fractionnements isotopiques liés à l'échappement atmosphérique, par une précision accrue sur la mesure des différents rapports isotopiques des gaz rares, mais aussi de l'oxygène (${}^{16}O/{}^{18}O$), de l'azote (${}^{14}N/{}^{15}N$), et du carbone (${}^{12}C/{}^{13}C$),
- d'établir une référence des rapports isotopiques des gaz rares atmosphériques martiens, vis-à-vis des rapports isotopiques des volatiles contenus dans les roches, les sols, et les glaces,
- de trouver des signatures isotopiques de dégazage passé, d'une érosion chimique de la surface, et des échanges entre l'atmosphère et les réservoirs de volatiles, pour améliorer les modèles d'interaction atmosphère/surface,
- de suivre les variations saisonnières des isotopes de H₂O (D/H), et de CO₂ $({}^{16}O/{}^{18}O)$, liées au cycle de l'eau sur Mars et à la climatologie actuelle,

- de trouver des traces de molécules potentiellement liées à l'activité biologique (CH₄, N₂O,...)

Enfin, les mesures visant O_2 , H_2 , et CO, dont les taux de mélange dépendent essentiellement de l'échappement, sont importantes, puisqu'elles permettraient de disposer de contraintes indépendantes de celles fournies par les modèles actuels.

Le spectromètre PALOMA est un instrument complexe, qui comprend en premier lieu une ligne de séparation des gaz, utilisant, d'une part, un getter au Zirconium (chauffé) pour la rétention des espèces réactives majoritaires telles que CO₂, CO, et N₂, et d'autre part, un système de cryostat utilisant les propriétés d'adsorption de charbons actifs placés sur une surface froide, pour piéger, puis relâcher sélectivement les gaz rares, en augmentant de façon contrôlée la température. L'eau, préalablement concentrée par un refroidisseur thermoélectrique, est réduite sous forme de H₂ par réaction sur l'Uranium. Un réacteur à Cu/CuO permet d'oxyder le carbone organique et de réduire les NO_x. A la suite de ce dispositif, on trouve un spectromètre qui travaille sous une pression de 10^{-6} à 10^{-7} torr, et qui réalise l'analyse en masse. Deux contraintes majeures sont imposées à ce spectromètre : d'une part, disposer d'une résolution suffisante pour séparer les isotopes 131 et 132 du Xenon présents à l'état de traces dans l'atmosphère, d'autre part, fournir une précision de mesure de l'ordre de 0.1% pour tous les isotopes. Ces spécifications impliquent une résolution en masse de l'ordre de 300, et surtout, de limiter les interférences entre les isotopes adjacents à moins de 0.1% du pic le plus faible.

6.1 Principe et description du spectromètre

Le prototype développé au CETP est un spectromètre à temps de vol. Cette technique présente deux avantages essentiels par rapport à celle qui utilise une déflexion magnétique : d'une part, le poids de l'appareil est considérablement réduit, d'autre part, la gamme de masse analysée au cours d'une mesure peut être étendue à volonté, ce qui offre une très grande dynamique de mesure pour le spectre en masse. La Figure 6.1 présente une vue schématique du spectromètre. Le gaz neutre est ionisé dans la source d'ionisation, et les ions créés sont injectés pendant un intervalle de temps relativement court (de l'ordre de 500 ns dans l'instrument actuel) dans l'espace de dérive (réflectron quadratique). Dans celui-ci, on impose un champ électrique qui défléchit les ions vers le détecteur (galette à micro-canaux (GMC)). Grâce aux anneaux (visibles sur le schéma), et à une optimisation de la géométrie de l'espace de dérive, on impose le long de l'axe du spectromètre un champ électrique, qui varie linéairement le long de l'axe. Cette configuration permet de corriger les aberrations en angle et en énergie, et d'obtenir un temps de vol qui ne dépend, en première approximation, que de la masse m et de la charge q des ions : $t_{vol} \propto \sqrt{\frac{m}{q}}$. Les résultats obtenus par une modélisation détaillée de l'ensemble du spectromètre et par des essais au laboratoire sont en excellent accord (Covinhes, 2006), et montrent que les spécifications indiquées ci-dessus sont atteintes.



FIG. 6.1: Schéma du prototype du spectromètre à temps de vol PALOMA. Dans cette configuration, les ions sortant de la source d'ionisation sont focalisés à l'entrée du réflectron, afin de minimiser les aberrations en angle et en position. Le réflectron, dont la dimension longitudinale influe directement sur la résolution en masse, possède ici une longueur de l'ordre de 150mm, et un rayon de 50mm.

6.2 Source d'ionisation

La source du spectromètre est représentée sur la Figure 6.2. Il s'agit d'une source pulsée, qui fonctionne selon deux modes : un mode de stockage, pendant lequel les ions créés sont confinés par un potentiel Vcorps de +1V appliqué aux électrodes délimitant le volume d'ionisation; un mode d'extraction, qui permet de diriger les ions formés vers l'entrée du réflectron, en appliquant un potentiel de +200V sur la paroi opposée à cette entrée. Une série d'électrodes placées à la sortie de la source permet la focalisation en temps du faisceau à l'entrée du réflectron, le temps nécessaire à l'extraction de l'ion le plus éloigné de la sortie étant de l'ordre de 100ns.

La source du prototype est actuellement équipée d'un filament de tungstène chauffé, et une optique adaptée a été développée pour la focalisation du faisceau. Les électrons pénètrent dans la zone d'ionisation par une ouverture latérale de $0.8 \times 2mm$. L'utilisation du filament entraîne une consommation importante, de l'ordre de 2 à 3W. D'autre part, sa température en fonctionnement atteint environ de 2000K, ce qui provoque un dégazage des éléments environnants chauffés par son rayonnement, et



FIG. 6.2: Vue en coupe du prototype de la source d'ionisation, actuellement équipée d'un filament. Les électrons sont focalisés en un faisceau parallèle, d'extension transversale (dans le plan de coupe) de l'ordre de 0.5mm, de manière à éviter les collisions avec les parois du volume d'ionisation, et la présence d'électrons en dehors de ce volume.

produit un bruit de fond susceptible de diminuer la sensibilité de l'instrument, en particulier pour l'hydrogène et l'oxygène, qui sont les constituants majoritaires des gaz dégagés par les surfaces. Pour ces raisons, le remplacement du filament par des cathodes à micropointes, ou plus vraisemblablement dans l'avenir, à nanotubes de carbones, apparaît comme une solution extrêmement intéressante. Nous avons donc étudié une optique électrostatique permettant une transmission optimale du faisceau, ce qui est beaucoup plus difficile que dans le cas d'un filament, car les électrons sont émis avec une énergie beaucoup plus forte, de l'ordre de 100eV, et une dispersion angulaire importante, de l'ordre de 40°. Dans le cas des sources à nanotubes de carbone on peut espérer que l'énergie sera, à courant émis identique, plus faible, de l'ordre de 100eV à quelques dizaines d'eV.

Pour une pression partielle de gaz dans le volume d'ionisation de l'ordre de 10^{-7} mbar, l'étude expérimentale du prototype réalisée par J. Covinhes a permis de fixer à $10\mu A$ l'intensité du courant moyen utile pendant le temps d'ionisation. Ce dernier est de $2.5\mu s$, avec un rapport cyclique de 17%(soit une période de $15\mu s$). L'énergie moyenne des électrons accélérés à partir du filament est de 80eV de manière à approcher le maximum des sections efficaces d'ionisation des constituants neutres.

Etant donné les dimensions de la section d'entrée de la source, et le niveau de courant requis, l'emploi d'une zone d'émission constituée de 1 à 4 rangées de 6 pixels est envisageable à partir des cathodes à micropointes, la dimension transversale d'une rangée étant de $360\mu m$. La tension d'extraction est d'environ 100V, de manière à obtenir une distribution d'énergie centrée sur une valeur de 75eV (voir la partie 2 pour la description des distributions d'énergie émises). Dans ces conditions le courant moyen émis par l'ensemble peut varier de 20 μA (pour une rangée) à 80 μA (pour 4 rangées), soit de 2 à 8 fois la valeur du courant requis. Cette configuration permet d'envisager une certaine flexibilité lors de la mise en œuvre. En particulier, l'énergie des électrons à la sortie des grilles d'extraction est directement corrélée au niveau de courant émis. Si l'on veut atténuer cet effet, on peut alors soit modifier le nombre de pixels émetteurs, soit modifier à la fois la tension d'extraction, et les potentiels de l'optique, ce qui est néanmoins assez compliqué étant donné la dispersion énergétique du faisceau. C'est pourquoi nous avons restreint l'étude qui suit à la première possibilité.

- L'optique électrostatique de transmission a donc deux objectifs :
- réduire la dispersion angulaire de la source, de manière à obtenir un faisceau parallèle dans le plan de coupe du volume d'ionisation,
- assurer une transmission suffisante du faisceau pour atteindre le niveau de courant requis.

Nous avons cherché dans un premier temps un système de lentilles simples permettant de réduire la dispersion angulaire du faisceau, au minimum dans le plan de coupe. Les systèmes classiques (lentilles de Einzel, lentilles quadrupolaires ...) dont les propriétés sont en général étudiées dans les conditions de Gauss, ne permettent pas de répondre facilement à de telles contraintes. Comme on l'a vu dans la deuxième partie, la distribution en angle du courant peut être approchée par une loi en cosinus de l'angle d'émission, 70% de l'intensité correspondant à un angle de 40° d'ouverture, 30% à un angle de 20°. La démarche que nous avons adoptée pour chercher une solution a consisté à effectuer une série d'essais, par simulation numérique, basée sur un système de N lentilles minces rectangulaires. Dans chaque cas les valeurs optimales des potentiels de ces lentilles sont calculées à l'aide d'un algorithme génétique. Cette méthode d'optimisation, employée avec succès lors de précédentes études d'optiques (Duvet, 2001; Racic, 1996), est basée sur la sélection naturelle d'individus au sein d'une population constituée dans ce cas d'un nombre déterminé de réalisations des potentiels. Une description synthétique de la méthode employée dans le cadre des optiques électrostatiques peut être trouvée dans (Duvet, 2001). Dans notre cas, la meilleure configuration obtenue par itération du nombre de lentilles, à partir de N=2, est un système à 4 lentilles, que nous décrivons ci-dessous. Dans la configuration adoptée, la grille d'extraction et les surfaces du volume d'ionisation sont polarisés à 0V.

La Figure 6.3 illustre les résultats obtenus dans les cas limités à 2 et 4 rangées de pixels symétriques par rapport à l'axe, lorsque la partie utile du faisceau se trouve dans un angle solide de $\pm 10^{\circ}$ d'ouverture, et dans le cas d'une seule rangée centrée, pour un angle limite de $\pm 20^{\circ}$. La transmission ainsi obtenue pour 4 rangées est de 73%, soit 17.5 μ A en terme de courant utile à l'ionisation, ce qui est supérieur au niveau de courant recherché. Dans le cas de 2 rangées, la transmission est de 82%, ce qui donne un courant de 9.8 μ A, de l'ordre de grandeur du courant souhaité. Pour un angle solide utile de $\pm 40^{\circ}$, les transmissions obtenues à 4 et 2 rangées, pour les potentiels indiqués sur la Figure 6.3, sont de 28% et 47%, soit des courants respectifs de 15.7 μ A et 13.1 μ A.

L'inconvénient de ce dispositif est dû au courant d'électrons intercepté par les électrodes, qui correspond à une puissance dissipée totalement inutile. Pour 4 rangées, la perte maximale de courant moyen s'élève à $64.3\mu A$. Pour des électrodes polarisées à 300V, et recueillant 30% de ce courant, la puissance crête consommée est alors de l'ordre de 40mW.

Pour une seule rangée émettrice centrée sur l'axe, il est possible d'obtenir, dans un angle solide de 40° , une transmission de 78%, soit un courant de $10.9\mu A$. Les potentiels appliqués dans ce cas sont beaucoup plus importants (respectivement de -2057V, 1549V, -207V, et -30V). Cependant, le courant non transmis est principalement collecté sur l'électrode de sortie polarisée à 0V, ce qui n'induit pas de puissance consommée.



FIG. 6.3: Optique de focalisation du faisceau issu des cathodes à micropointes. En haut à gauche : 2 rangées de pixels symétriques par rapport à l'axe, émettant dans un angle solide de 20° . En haut à droite : 4 rangées de pixels symétriques par rapport à l'axe, émettant dans un angle solide de 20° . En bas à gauche : coupe en perspective du dispositif. En bas à droite : une rangée centrée sur l'axe, émettant dans un angle de 40° , les potentiels appliqués aux électrodes dans ce cas sont respectivement de (-2057V, 1549V, -207V, et -30V).

170

Etant donné le faible niveau de courant requis, la configuration optimale d'émission est celle utilisant deux rangées de pixels centrées sur l'axe. L'avantage de cette solution est de minimiser la partie du faisceau interceptée par les électrodes de l'optique, et de faciliter l'ajustement du niveau de courant à la valeur nécessaire au cours de la durée de vie des émetteurs. Elle permet également de disposer d'une forte redondance, puisque les prototypes de cathodes fabriquées par le LETI sont organisés en 8 lignes de 32 colonnes, ce qui permet de disposer au total de 20 groupes de 12 pixels.

CHAPITRE 7______ Le spectromètre HNA (Hot Neutral Analyzer) et la mesure des neutres chauds

7.1 Objectifs



FIG. 7.1: Schéma block 3D de l'ensemble DEMAI (Dynamics and Escape of the Martian Atmosphere and Ionosphere) envisagé sur la plateforme DYNAMO. L'analyseur de neutres chauds (Hot Neutral Analyser) est associé à un spectromètre de masse (Ion and Neutral Sensor) permettant la caractérisation des neutres thermiques et du plasma thermique et suprathermique de l'environnement Martien.

L'étude des mécanismes d'interaction du vent solaire avec la haute atmosphère de Mars figurait parmi les objectifs de la mission DYNAMO (Chassefière et al., 2004), proposée dès 2002 à l'initiative de l'IPSL, par un consortium composé d'une vingtaine de laboratoires français et étrangers, dans le cadre de l'Appel d'Offre Mars PREMIER 2007 du CNES. Par suite de l'arrêt de ce programme, un projet semblable, MEMO (Mars Escape and Magnetic Orbiter), est actuellement soumis dans le cadre du programme Cosmic Vision de l'ESA. Un ensemble instrumental (Figure 7.1), dédié à l'étude de la dynamique des environnements neutre et ionisé de la planète, prévoyait la mesure de la composition du plasma thermique de l'ionosphère et de l'exosphère (visant les ions majoritaires O^+ , O_2^+ , CO_2^+ , et H^+), la mesure de la composition chimique des espèces minoritaires (telles que He^+ , C^+ , CO^+ , CO_2^{++} et NO^+), et la mesure des distributions énergétiques et angulaires du plasma suprathermique, dans la gamme [10 - 200eV]. Cette partie était assurée par le spectromètre de masse INS (Ion and Neutral Sensor), dérivé en partie de l'instrument DYMIO réalisé par le CETP pour la mission Mars96 (Berthelier et al., 1998). La mesure des densités et de la composition chimique de la thermosphère, et la détermination des échelles de hauteur des espèces neutres majoritaires devaient également être effectuées par ce spectromètre, équipé d'une source d'ionisation. Enfin, la quantification des distributions en masse et en énergie des flux de neutres énergétiques, et leurs variations avec l'altitude, en fonction de l'angle zénithal solaire, était assurée par l'analyseur de neutres chauds HNA, qui fait l'objet du travail présenté dans ce chapitre.

L'étude présentée ici se décompose en trois parties. Dans un premier temps, nous décrivons la conception et la modélisation de la source d'ionisation du spectromètre HNA, qui nécessite, pour sa réalisation, d'utiliser des cathodes à effet de champ semblables à celles que nous avons étudiées dans la partie II. Ensuite, nous donnons une description de principe du spectromètre et de ses éléments principaux : source d'ionisation, analyseur en énergie permettant l'acquisition instantanée du spectre des neutres pénétrant dans la source, analyseur en masse, et détecteur. Nous terminons par une présentation des mesures qu'un tel instrument serait susceptible de fournir, en soulignant les caractéristiques observationnelles permettant de différencier les processus non-thermiques à l'origine des neutres de la couronne, à partir des résultats de simulation de la formation de la couronne neutre suprathermique réalisée dans la première partie de la thèse.

7.2 Etude d'une source d'ionisation à très grande luminosité

7.2.1 Objectifs

L'objectif est ici de modéliser une source à très grande luminosité, qui est indispensable pour permettre la détection des populations de neutres de très faible densité. A l'inverse du spectromètre de masse PALOMA, qui fonctionne en mode pulsé, on considère ici une configuration de source ouverte fonctionnant en continu. Les particules neutres pénétrant dans la source ont une vitesse qui résulte de leur mouvement propre et de la vitesse de la sonde, de l'ordre de $4km.s^{-1}$ au niveau de l'exobase. Le spectomètre doit permettre de mesurer:

⁻ les flux directionnels des neutres chauds, dans un angle solide le plus grand possible. Les espèces

visées en priorité sont O, C, N, CO₂, et éventuellement CO, N₂, O₂, H₂, et Ar, Ne, et He.

- la distribution en énergie et la distribution angulaire des neutres chauds.

Les flux attendus en entrée étant très faibles, la source d'ions doit posséder une très grande efficacité, supérieure de plus d'un ordre de grandeur à celle des sources d'ionisation classiques. L'utilisation des cathodes à émission de champ, à base de micropointes ou de nanotubes, apparaît comme la seule solution permettant d'obtenir la sensibilité souhaitée, car elles offrent à la fois une grande surface d'émission (~ $1cm^2$) et une densité de courant très importante (jusqu'à $10mA.cm^{-2}$).



FIG. 7.2: Sections efficaces totales d'ionisation en fonction de l'énergie incidente des électrons (le gaz étant au repos), pour l'oxygène atomique (graphique de gauche), et le CO_2 , (graphique de droite). Les différentes courbes correspondent à différentes résultats publiés et montrent une bonne concordance des mesures (source:NIST).

L'ionisation d'un atome ou d'une molécule par collision avec un électron se produit lorsque l'énergie cinétique de ce dernier est supérieure à l'énergie de première ionisation de la cible (13.61 eV pour l'oxygène, du même ordre que pour l'hydrogène). Toutefois une partie de l'énergie incidente peut être utilisée pour l'excitation interne de la particule, ce qui entraîne une variation de la probabilité d'ionisation en fonction de la vitesse relative entre les électrons et la cible. Les sections efficaces d'ionisation de O et de CO_2 , dont les variations avec l'énergie sont présentées sur la Figure 7.2, atteignent leur maxima pour des énergies proches de 90 eV. Au voisinage du maximum les sections efficaces varient lentement, ce qui permet de choisir l'énergie du faisceau dans une plage assez large, typiquement entre 80 et 120eV pour la majorité des composés atmosphériques. Etant donné ces énergies, les vitesses des neutres suprathermiques dans la gamme [1 - 20eV] que l'on considère, restent comparativement plus faibles (d'un facteur 100 environ), et tout se passe comme si le gaz était au repos dans le référentiel de la source par rapport aux électrons.

Dans la suite de cette section, nous décrivons le modèle de source envisagé pour effectuer cette mesure. On s'intéresse en particulier au calcul des performances de cette source, à partir des caractéristiques mesurées des cathodes à micropointes. Les résultats sont totalement transposables au cas des cathodes à nanotubes de carbone, dont la géométrie est comparable, et les propriétés semblables, en terme de densité de courant émis. Outre leur sensibilité réduite à l'environnement, un avantage décisif des cathodes à nanotube vis-à-vis de cette mesure est de permettre une émission en continu, si l'on se réfère à la technologie développée par TRT (cf. section 3.3.2 de la partie II), alors que les cathodes à micropointes ne peuvent fonctionner qu'en régime pulsé. Comme on va le voir, ce mode de fonctionnement est nécessaire pour la mesure que nous envisageons.

7.2.2 Géométrie de la source



FIG. 7.3: Schéma de la source d'ionisation de HNA. Le volume d'ionisation est découpé en 7 canaux de 2mm de largeur. De ce fait le potentiel lié à la charge d'espace électronique est minimisé (voir détails dans le texte). La trajectoire rouge définit le cône limite d'acceptance angulaire de la source.

La définition de la source s'inspire très largement d'une étude précédente, conduite en collaboration entre le CETP et l'Université du Texas, à Dallas (Berthelier J.J et Hodges R.R., communication personnelle). La Figure 7.3 présente un schéma en coupe de la source, dont la surface d'entrée, de section carrée, est de $1cm^2$. La grille (G1) est en contact avec la paroi externe du satellite, polarisée au potentiel Vsat. La grille (G2) est polarisée à un potentiel Vrep, ajusté en fonction de Vsat, de manière à repousser les ions du plasma, dont le flux est de plusieurs ordres de grandeur supérieur à celui des ions créé par l'ionisation des neutres dans la source. Le potentiel du satellite peut en effet atteindre des valeurs négatives supérieures à -2V dans l'ionosphère de Mars, d'après les données rapportées par les analyseurs à potentiel retardateur des atterisseurs de la mission Viking. La grille d'entrée (G3) de la source, ainsi que toutes ses parois, sont maintenues la masse. Une cathode à micropointes dont la surface émissive est de $1.26cm^2$, constitue la source d'électrons. Ceux-ci sont émis perpendiculairement à la direction moyenne d'entrée des neutres dans l'instrument. Les grilles d'extraction de la cathode étant polarisées au potentiel de la source, les contacts cathodiques des pointes doivent être polarisés à un potentiel de l'ordre de -100V. La géométrie de la source est adaptée, comme on va le voir, à la configuration de l'analyseur en énergie décrit dans la section suivante. Les particules neutres entrent dans la source dans un cône d'environ 12° de demi-angle (trajectoire rouge). L'angle limite est déterminé par la dispersion angulaire maximale permettant d'obtenir une résolution en énergie dans l'analyseur de 0.5eV sur la gamme de mesure, car la dispersion dans l'analyseur d'énergie augmente avec l'angle d'incidence (voir la section 7.3). Les directions et vitesses des ions formés dans le volume d'ionisation, de l'ordre de 1cm³, subissent l'influence du potentiel dû à la charge d'espace du faisceau d'électrons. Nous avons réalisé un modèle numérique de la source, qui prend en compte l'effet de charge d'espace, et permet de calculer le flux de neutres ionisés et les distributions en énergie et en angle des ions créés en sortie de source. Ce modèle permet de déterminer l'intensité du faisceau d'électrons nécessaire pour assurer la sensibilité souhaitée du spectromètre.

7.2.3 Charge d'espace électronique dans la source et influence sur le fonctionnement

Le potentiel lié à la densité de charges du faisceau d'électrons émis est calculé par résolution de l'équation de Poisson dans le volume d'ionisation, les conditions aux limites étant imposées par les potentiels des parois. Le volume de calcul est un parallélépipède dont les faces représentent les parois internes de la source d'ionisation schématisée sur la Figure 7.3. Le maillage utilisé est de 0.5mm. La méthode de calcul employée s'inspire de celle développée dans Séran et al. (2005), pour la modélisation d'une sonde de Langmuir. Dans ce schéma, le potentiel électrostatique V_k en chaque nœud du maillage est calculé à partir de la répartition des charges de volume q_{vi} et de surface q_{si} des électrodes constituant les parois de la source, selon la relation :

$$V_k = \sum_{i \neq k} \frac{q_{si}}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}} + \sum_{j \neq k} \frac{q_{vj}}{4\pi\epsilon_0 r_{jk}} + \frac{q_k}{4\pi\epsilon_0} \int_{S,V} \frac{du}{r}$$
(7.1)

où q_k est la charge associée au nœud k, situé au centre d'une maille de surface S, si le nœud est sur la surface d'une électrode, ou de volume V, si le nœud est inclus dans le volume d'ionisation.

Le flux d'électrons émis par la cathode est modélisé à partir des distributions obtenues dans la partie 4. Un nombre Ne d'électrons est lancé dans la boîte de calcul tous les N(=300) pas de temps. Si Φ_e est le flux d'électrons total émis, la charge associée à chaque maille dans le volume (et répartie de manière homogène entre ses nœuds), est :

$$q = \frac{e[\Sigma\delta t]\Phi_e}{Ne} \tag{7.2}$$

où e est la charge de l'électron, et δt représente le temps passé par un électron dans la maille considérée.

La première étape du calcul consiste à déterminer la matrice des charges de surface, en tenant compte des conditions aux limites imposées par les potentiels des électrodes et les charges de volume, celles-ci étant nulles lors de la première itération. Il s'agit donc de résoudre le système matriciel suivant :

$$[V_0] - [V_v] = [A][Q_s] \tag{7.3}$$

où A est la matrice des coefficients d'interaction électrostatique $a_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$ associés à la charge de surface présente au nœud j, dont la contribution est calculée en i. $[V_0]$ et $[V_v]$ sont les vecteurs dont les éléments V_0^i et V_{vi} sont respectivement les potentiels des parois de la source, et des contributions volumiques. Ces derniers sont donnés par:

$$V_{vi} = \sum_{j \neq i} \frac{q_{vj}}{4\pi\epsilon_0 r_{ji}} \tag{7.4}$$

Les contributions de surface étant connues, le potentiel en chaque point de maille est calculé à l'aide de (7.1).



FIG. 7.4: Variations du potentiel de charge d'espace dans le plan médian de la source parallèle à la direction de vitesse des électrons (en abscisse). Les courbes vertes, rouges, et bleues correspondent à des densités de courant respectives de 10, 5, et 1 mA.cm⁻². Les potentiels en traits continus représentent le cas où le volume de la source n'est pas compartimenté. La symétrie du modèle entraîne un puits de potentiel de forme parabolique. Les traits discontinus représentent le potentiel lorsque la source est compartimentée (voir détails dans le texte). Le facteur de réduction du potentiel de charge d'espace obtenu est de l'ordre de 40.

Le critère de convergence est fourni par la variation des potentiels entre deux itérations successives. Le calcul s'arrête généralement lorsque cette variation est inférieure à $10^{-3}V$.



FIG. 7.5: Distributions de la charge d'espace dans les plans médians de la source, équipée (rangée supérieure) ou non (rangée inférieure), du dispositif de minimisation du potentiel. Le vecteur vitesse moyen des électrons est dirigé suivant l'axe X. L'axe Z est orienté dans la direction d'arrivée des ions. Les variations de densités locales observées sont dues aux fluctuations statistiques de la charge portée par le faisceau modélisé. La charge d'espace présente en chaque nœud du maillage de la source est de l'ordre de 10^{-15} C.

Le potentiel de charge d'espace en régime permanent a été calculé pour des courant émis de 1, 5, et $10mA.cm^{-2}$. Les résultats sont représentés par les courbes continues de la Figure 7.4, où X est dirigé suivant la vitesse des électrons. La symétrie du volume de calcul entraîne une forme quasi parabolique du potentiel, avec une bonne uniformité étant donné l'homogénéité du faisceau émis sur toute la surface. Comme le montre la figure, le minimum du potentiel se situe au centre du volume d'ionisation. La distribution de la densité de charges est présentée sur la Figure 7.5 (rangée inférieure) dans des plans orthogonaux et sécants au centre de la source. Des disparités spatiales y sont visibles, dues aux variations statistiques de la charge portée par le faisceau modélisé. Comme on peut le voir le puits de potentiel atteint environ -12V pour une densité de courant émise de $10mA.cm^{-2}$. La variation du potentiel étant linéaire par rapport à la densité de courant, à énergie égale, le potentiel de charge d'espace atteindrait donc environ -30V pour une densité de courant de $25mA.cm^{-2}$, obtenue pour une tension d'extraction de 100V.

Ce calcul montre qu'un tel puits de potentiel empêcherait l'extraction des ions créés dans la source à partir des neutres, dont les énergies sont pour une grande partie inférieures à 5eV. Il est donc essentiel de trouver un moyen permettant de diminuer le potentiel lié à la charge d'espace dans la source. La solution consiste à compartimenter le volume d'ionisation en sous volumes séparés par des plans équipotentiels matérialisés par des grilles à 0V. De cette façon, la somme des contributions des charges au potentiel central de ces volumes est également divisée, et le potentiel résultant notablement plus faible.

En particulier, on peut montrer que la valeur centrale du potentiel entre deux plans séparés d'une distance d est égale à :

$$\Phi = \frac{Jd^2}{8\epsilon_0 v_e} \tag{7.5}$$

où J est la densité de courant émise, et v_e la vitesse électronique. Cette relation indique qu'il suffit de diviser la distance entre des plans polarisés à 0V par \sqrt{n} pour diviser le potentiel par n. Etant donné la dimension transversale de la source (14 mm) et un puits de potentiel d'environ -30V dans le cas d'un faisceau portant une densité de courant de $25mA.cm^{-2}$, il est nécessaire d'imposer une distance entre les plans de l'ordre de 2mm afin d'obtenir un puits de potentiel inférieur à environ 1 eV.

Les courbes discontinues de la Figure 7.4 montrent les résultats obtenus pour une source segmentée en 7 compartiments, d'environ 2mm de large. Cette solution permet de diviser le potentiel par un facteur d'environ 40 au centre de la source, pour les valeurs de courants envisagées, ce qui ramène le maximum du puits de potentiel à -0.75eV pour une densité émise de $25mA.cm^{-2}$.

Soulignons que l'existence de ce potentiel entraîne une dispersion énergétique des ions créés dans les différents canaux (dont les parois sont maintenues à 0V), qui constitue une limite intrinsèque à la résolution de l'analyseur en énergie qui suit la source.

Enfin, l'inconvénient de cette configuration provient des collisions entre les particules neutres ou ionisées et les grilles formant les plans équipotentiels, qui réduisent les flux d'ions sortant de la source. Il est donc indispensable d'utiliser des grilles de très grande transparence, constituées éventuellement de simples fils parallèles de très faibles diamètre.

7.2.4 Sensibilité de la source

A partir des distributions de vitesses des neutres O, C, CO_2 , et CO, calculées dans la première partie de la thèse, nous avons estimé les flux d'ions sortant de la source équipée des grilles permettant de réduire la charge d'espace, en négligeant les pertes par collision des particules sur les grilles.

Une approche simple du type Monte Carlo nous permet de simuler la création d'ions dans la source, en fonction du flux de neutres incident, et de la densité des électrons émis par les cathodes. A partir des cartes de densités et de vitesses moyennes des électrons établies précédemment pour un niveau de courant donné, le taux d'ionisation moyen pour l'espèce p est donné dans chaque cellule i par :

$$\tau_i = n_{e_i} \sigma_p v_{e_i} \frac{\phi_n}{\bar{v_n}} \tag{7.6}$$

où n_{e_i} et v_{e_i} sont les densités et vitesses des électrons dans la cellule i, σ_p est la section efficace d'ionisation de l'espèce p (considérée ici comme indépendante de la vitesse relative entre les neutres et les électrons), ϕ_n le flux de neutres dont les vitesses sont comprises dans un intervalle $[\bar{v_n} - dv/2, \bar{v_n} + dv/2]$ dans le champ de vue de l'instrument, $\bar{v_n}$ étant la vitesse moyenne des neutres relativement au satellite dans cet intervalle. Le taux d'ionisation moyen τ^i_{moy} dans la cellule i est alors déterminé à partir de la distribution en énergie des neutres en entrée de la source. Le taux d'ionisation moyen sur l'ensemble des cellules, τ_{moy} , permet alors de déterminer le temps (distribué suivant une loi de Poisson) séparant la création de deux ions dans le volume par:

$$t_{ion} = -\frac{1}{\tau_{moy}} ln(\eta) \tag{7.7}$$

où η est un nombre aléatoire uniformément réparti entre 0 et 1. Une population de neutres, dont la distribution des vitesses est fournie par la modélisation effectuée dans la partie I, est lancée dans le volume, à la fréquence de $\nu = \phi_n S_{ent}$ où la surface d'entrée de l'instrument est $S_{ent} = 1cm^2$. Parmi les neutres présents dans la source, un ion est créé toutes les t_{ion} secondes, son identité parmis les neutres étant déterminée à partir de la répartition statistique des taux d'ionisation locaux, de manière à représenter de façon correcte la variation du taux d'ionisation dans les différentes cellules.

Les résultats présentés ci-dessous ont été calculés avec un courant émis de 5mA. Le taux d'ionisation variant linéairement avec la densité de courant, il suffit toutefois d'appliquer un facteur 5 pour obtenir le taux à 25mA, en tenant compte de la perte de flux pour les énergies inférieures à 0.75eV dans ce cas.

Les trajectoires des ions créés par le modèle numérique décrit précédemment sont ensuite calculées à l'aide du logiciel SIMION3D. La Figure 7.6 montre ces trajectoires et notamment celles des ions piégés dans les configurations de source avec (figure de gauche) et sans (figure de droite) segmentation. Les différentes couleurs indiquent les gammes d'énergie auxquelles appartiennent les ions représentés : marron pour [E < 0.1eV], orange pour [0.1eV < E < 1eV], bleu pour [3eV < E < 4eV], vert pour [4eV < E < 5eV], et rouge pour [5eV < E < 6eV]. Cette représentation met en évidence la perturbation des directions de vitesses initiales des neutres pénétrant dans la source aux basses énergies.



FIG. 7.6: Simulations du piégeage des ions dans la source, et de la perturbation de leurs trajectoires, à partir de SIMION3D, dans les deux configurations de source (détails dans le texte).



FIG. 7.7: Effet du potentiel de charge d'espace dans la source segmentée sur des faisceaux monocinétiques de neutres de 3, 6, et 9eV. La dispersion énergétique des ions en sortie de source est environ de 0.3eV sur cette gamme, pour un courant d'électrons de 5mA.

L'effet du potentiel de charge d'espace sur la dispersion énergétique du faisceau sortant est par ailleurs représenté sur la Figure 7.7. Pour trois faisceaux de neutres monocinétiques d'énergies respectives de 3, 6, et 9 eV, la dispersion obtenue est de 0.3eV, c'est-à-dire de l'ordre de l'amplitude de puits de potentiel au centre de la source.



FIG. 7.8: Taux de comptages obtenus au maximum d'activité solaire dans le cas de la recombinaison dissociative (figure de gauche), et du criblage (figure de droite) à 1000km d'altitude. Les lignes en pointillés indiquent la zone de limite de sensibilité du détecteur, entre 1 et 0.1 cps.s⁻¹.

Enfin, la Figure 7.8 présente les taux de comptage obtenus en sortie de source pour l'oxygène chaud au maximum d'activité solaire, à une altitude de 1000km, dans le cas du criblage (figure de droite), et de la recombinaison dissociative (figure de gauche). Ces estimations sont représentatives des régions où le satellite rencontre le maximum d'efficacité des mécanismes étudiés, c'est-à-dire respectivement au voisinage du terminateur, et du point subsolaire. L'écart entre les courbes vertes et rouges permet d'apprécier le gain décisif obtenu avec un courant de 25mA à cette altitude, par rapport à un courant de 5mA. En effet la zone comprise entre $0.1c.s^{-1}$ et $1c.s^{-1}$ constitue la limite de sensibilité des détecteurs usuels (galette à microcanaux par exemple), et on s'aperçoit qu'une partie non négligeable des distributions se trouve dans cette zone, dans le second cas.

Le taux de comptage maximal dans le cas de la recombinaison dissociative est d'environ 15 $coups.s^{-1}$, et de l'ordre de 100 $coups.s^{-1}$ par seconde pour le processus de criblage (ce maximum plus élevé dans le cas du criblage résulte de l'influence prépondérante des particules d'énergies < 1eV, comme l'illustrent les Figures 7.15, 7.16 de la section suivante). La décroissance du flux dans le cas du criblage est très rapide puisque le taux devient inférieur à 1 cp/s pour des énergies d'environ 6 eV (correspondant à des énergies d'environ 4eV dans le référentiel de Mars). Dans le cas de la recombinaison dissociative, ce taux limite est atteint pour des énergies voisines de 4eV.

L'efficacité de la source calculée dans ces conditions est de 4.15×10^{-3} A/torr à 5mA, et de 1.7×10^{-2} A/torr à 25mA, soit environ 100 fois plus grande que pour des spectromètres classiques.

A titre comparatif nous avons rassemblé, dans le Tableau 7.1, les caractéristiques de différentes sources employées au cours de précédentes missions planétaires, depuis les sondes Viking en 1976 jusqu'à Rosina, l'orbiteur de la mission Rosetta qui atteindra la comète Churyumov-Gerasimenko en 2014.

Mission	Corps	Masses	Energie	Sensibilité	Densité	Courant
				(A/torr)	(source) (cm^{-3})	(A)
Viking	Mars	1-7	Th	ND	ND	ND
(1976)		7-49 (DFMS)				
PVO	Venus	1-45	Th	ND	ND	ND
(1978)		(Quadr $)$				
Giotto	Halley	1-38 (M)	Th	ND	ND	ND
(1986)		1-56(E)/(DFMS)				
Nozomi	Mars	1-60	Th	5.3(-6)	$170/10^{12}$	ND
(echec 2003)		(Quadr $)$				
Cassini	Titan/Saturne	1-8	Th	1.3(-4)	$1.2 \times 10^4 / 10^{12}$	4.1(-5)
(2004)		12-99 (Quadr)				
Rosina	Churyumov	12-100 (DFMS)	Th	10(-5)	$30/10^{11}$	2/200(-3)
(2014)	-Gerasimenko	1-300 (TOF)		1(-4)	$0.3/10^{10}$	
PALOMA	Mars	1-140 (TOF)	Th	8(-5)	3×10^9	1(-5)
(20??)						
HNA	Mars	1-45	supraTh	5(-3) -	$\max(10/500)$ -	2.5(-2)
(20??)		(M ou TOF)		1.7(-2)	$\min(0.5/60)$	

Le gain en sensibilité avec les niveaux de courants envisagés dans le cas d'HNA est notable, puisqu'il est de 2 à 3 ordres de grandeur, par rapport aux spectromètres classiques.

TAB. 7.1: Performances de sources d'ionisations employées au cours de différentes missions planétaires (passées, actuelles, et futures!) prévoyant des mesures par spectrométrie de masse. DFMS=Double Focusing Mass Spectrometer, TOF=Time of Flight, M=Magnetic, E=Electrostatic, Quadr=Quadrupolar, Th=thermique, ND=Non Disponible.

7.3 Principe du spectromètre HNA

Les flux attendus en sortie de la source d'ionisation étant très faibles, l'objectif essentiel est de pouvoir mesurer l'ensemble du spectre en énergie en permanence, ce qui suppose de supprimer le balayage en énergie effectué dans les analyseurs classiques de la plupart des spectromètres. Il s'agit ensuite de déterminer la masse de chaque ion sortant de l'analyseur en énergie.

7.3.1 Analyse en énergie

Une coupe médiane de l'analyseur en énergie est représentée sur la Figure 7.9. Cet analyseur s'inspire directement de l'instrument NMS embarqué sur la sonde cométaire GIOTTO et développé au CETP. Comme on peut le voir sur la figure, il fournit sur le détecteur une image instantanée du spectre en énergie des ions issus de la source. La définition de la configuration des potentiels permettant d'aboutir à la focalisation du faisceau a été effectuée en deux temps. Dans un premier temps, une série de 12 électrodes planes, représentées sur la figure placée en encart dans la Figure 7.9, placées face à la sortie de la source et du détecteur, a été définie. Les potentiels de ces électrodes ont ensuite été optimisés, de façon à obtenir la focalisation souhaitée. Dans un second temps, à partir du tracé



FIG. 7.9: Simulation des trajectoires de l'oxygène suprathermique pénétrant dans la source avec un angle de 4° (Hodges, communication privée). L'analyseur disperse les ions sur le plan de sortie en fonction de leur énergie. Les ions sont ensuite accélérés vers le détecteur par l'application d'une différence de potentiels de 500V. Dans cette configuration, le détecteur à localisation placé dans le plan de sortie sélectionne les ions dans une gamme de 1 à 11 eV.

des équipotentielles du système obtenu, une forme d'électrode matérialisant l'une des équipotentielle a été introduite (l'électrode portée à 37.5 V sur la Figure 7.9), de façon à minimiser le nombre total de potentiels à alimenter dans l'instrument. On notera en outre que l'électrode en question est en partie constituée par une grille (représentée par des points sur l'électrode de la Figure 7.9), permettant d'éviter la réflection de photons UV, pouvant générer un bruit de fond important au niveau du détecteur. Cette configuration, très avantageuse puisqu'elle permet la mesure en continu du spectre en énergie, impose de limiter les angles d'incidence des ions à l'entrée de l'analyseur, puisque la résolution en énergie de l'analyseur décroît lorsque la dispersion angulaire du faisceau entrant augmente. Le calcul des trajectoires effectué par R.R. Hodges (Hodges R.R., communication privée), montre en effet que le cône de divergence du flux incident doit être limité à un demi-angle d'environ 12°. Pour des angles supérieurs, la focalisation sur le plan de sortie ne permet plus de distinguer des écarts d'énergie inférieurs à 1eV. En fait, comme on l'a évoqué au paragraphe précédent, c'est la géométrie de la source qui permet de limiter le champ de vue de l'instrument, et les angles d'incidence des ions dans cet analyseur.

En outre, entre la sortie de la source et l'entrée dans l'analyseur, les ions sont accélérés grâce à la grille de pré-accélération polarisée au potentiel $V_{PAP} = 25V$. Ces ions bénéficient ainsi d'une focalisation sensible, et leur dispersion angulaire maximale est ramenée de 12° à environ 4°. La Figure 7.9 représente les trajectoires d'un faisceau d'oxygène atomique chaud d'énergies discrètes réparties entre 1 et 11eV par pas de 1eV, et dont l'angle d'incidence avec la normale à la surface d'entrée de l'analyseur est de 4°. Dans la configuration représentée la géométrie de sortie est telle que les particules au niveau du détecteur sont séparées dans des canaux espacés de 1eV. On constate que la dispersion des taches de focalisation au niveau du détecteur augmente légèrement avec l'énergie. Dans ce cas de figure, le système permettrait d'obtenir une résolution en énergie de l'ordre de 0.5eV, sur la gamme [1-11] eV.

7.3.2 Analyse en masse

L'analyse en masse n'a pas pu être étudiée en détail, faute de temps, mais deux concepts possibles pour sa mise en œuvre sont illustrés schématiquement sur les Figures 7.10 et 7.11. Les ions sortant de l'analyseur sont accélérés par un potentiel de l'ordre de 500V, et l'optique électrostatique de focalisation permet de concentrer leurs trajectoires au voisinage du plan médian, parallèle au plan des trajectoires représentées sur la Figure 7.9.

La première solution consiste à employer un analyseur magnétique (Figure 7.10). Dans ce cas, les ions sont dirigés à l'entrée d'un secteur magnétique de type Mattauch-Herzog (McDowell, 1963). L'intérêt de cette configuration est de fournir en sortie une image du spectre en masse des ions incidents : les ions sont focalisés le long de la direction Y sur le plan de sortie, en des positions qui varient linéairement en fonction de leur masse. Un tel dispositif présente l'avantage de la simplicité de l'électronique associée au détecteur, puisqu'il s'agit de mesurer les 2 coordonnées du point d'impact des ions suivant X (énergie) et Y (masse).

Son inconvénient majeur est le poids, puisque l'analyseur magnétique doit disposer d'un entrefer d'environ 15mm, et permettre d'analyser des ions dont l'énergie est de l'ordre de 500eV, avec une



FIG. 7.10: Représentation schématique de l'analyseur, avec un tri en masse utilisant un secteur magnétique de type Mattauch-Herzog. Le faisceau sortant de la source d'ionisation est dispersé en énergie suivant l'axe X, et en masse suivant l'axe Y. Le détecteur imageur est placé dans le plan X-Y, qui correspond au plan de sortie de l'aimant.

gamme de masse allant de 1 à 48amu. En considérant un rayon de giration de l'ordre de 30mm pour l'ion CO_2^+ , correspondant à un champ magnétique 7000 Gauss, une estimation rapide conduit à un poids de l'ordre de 1.5 à 2 kg.

Pour la seconde solution, nous avons envisagé le principe de l'analyse par temps de vol, grâce au dispositif schématisé sur la Figure 7.11. Ce dernier est basé sur l'emploi d'un champ électrique variable dans le temps, traversé par les ions en sortie de l'optique de focalisation. Ainsi, on impose entre les électrodes de déflexion représentées sur la figure, un champ électrique E_0 variable dans le temps avec une fréquence de l'ordre de 1MHz, suivant une loi en dents de scie, comme indiqué sur la Figure 7.12. En supposant constant le champ E_0 pendant le temps que passe l'ion entre les électrodes, on peut facilement calculer, en fonction de l'énergie de l'ion, l'angle de déflexion de sa trajectoire, et la position de son point d'impact suivant l'axe Z, le long de la GMC. Le décalage Δz_i du point d'impact de l'ion i par rapport au plan médian est donné par :

$$\Delta z_i = \frac{leE_0d}{4Ec_i} \tag{7.8}$$

où l est la distance entre les électrodes de déflexion et le détecteur, d la largeur des électrodes, et Ec_i l'énergie cinétique de l'ion i.

Réciproquement, la connaissance de la position de la coordonnée z du point d'impact permet de déterminer la valeur du champ de déflexion E_0 d'après (7.8), donc l'instant t₀ de passage de l'ion entre les électrodes (cf. Figure 7.12). En supposant par ailleurs que l'on sait mesurer le temps t₁ d'impact sur le détecteur, le temps de vol t₁-t₀ dans l'espace de dérive permet de connaître la composante normale



FIG. 7.11: Représentation schématique de l'analyseur, avec un tri en masse utilisant un temps de vol. Dans cette configuration, le faisceau sortant de la source est dispersé en énergie suivant l'axe X, et en masse suivant l'axe Z, à l'aide du champ électrique variable E. Le détecteur imageur est positionné dans le plan XZ, parallèle au plan de sortie de l'analyseur en énergie.



FIG. 7.12: Variations en dents de scie du champ électrique appliqué aux électrodes de déflexion.

de la vitesse Vz_i , puisque $Vz_i = \frac{\Delta z}{t_1 - t_0}$.

Grâce à la dispersion en énergie du faisceau, les ions d'énergies différentes atteignent la GMC en des points situés le long de l'axe X. Pour chaque position, on connaît l'énergie de l'ion Ec_i et, la vitesse étant déterminée par le temps de vol, on peut remonter facilement à la masse, donnée finalement par :

$$m_i = (t_1 - t_0)^2 \frac{2Ec_i}{(\Delta z_i)^2} \tag{7.9}$$

Cette solution possède l'avantage d'offrir un poids très réduit, mais nécessite, pour générer un champ E rapidement variable, une puissance non négligeable, qu'on peut estimer de 2 à 3 W. Le gain en poids étant souvent une contrainte majeure, cette solution est probablement la plus réaliste.

7.4 Evaluations des performances de l'analyseur HNA, et simulation de la mesure des neutres chauds

7.4.1 Contraintes issues du modèle d'exosphère

La structure de la couronne neutre suprathermique a été décrite au chapitre 2 de la partie I. Pour les espèces que nous avons considérées (O, CO_2 , CO, et C), et pour les processus non thermiques de recombinaison dissociative et de criblage, les plages de densités obtenues au minimum et au maximum d'activité solaire sont données, pour deux altitudes, dans le tableau 7.2.

Espèce	Densité (smin 270km -smax 375 km) (cm^{-3})	Densité (smin - smax) 1000km (cm^{-3})
0	200-12000	15-2100
CO_2	40-1500	6.5-400
CO	18-800	2.5-200
С	0.65-100 / 4-200	0.27-17 / 1.62-34

TAB. 7.2: Densités moyennes (cm^{-3}) dans la couronne suprathermique à 270 et 1000km au minimum d'activité solaire, et à 375 et 1000km au maximum d'activité. Dans le cas du carbone les valeurs en italique sont des estimations tenant compte des principales sources (photodissociation de CO et recombinaison dissociative de CO_2^+).

Au minimum d'activité solaire, les seuils de densité sont fixés par le processus le moins efficace, c'est-à-dire le criblage. Au maximum d'activité solaire, c'est au contraire la recombinaison dissociative qui les détermine. Comme on l'a vu au paragraphe 2.4.1, dans ces conditions, le facteur entre les densités exosphériques produites par les deux processus est inférieur à 2.

Contrairement à ce que laissent présager ces densités, en raison des distributions de vitesse des produits de chacun de ces processus (cf. Figure 2.27), et, comme on va voir un peu plus loin, de l'orientation de la direction de visée de l'instrument, la détection des neutres chauds issus du criblage s'avère grandement facilitée au maximum d'activité solaire.

Dans une configuration d'orbite polaire, nous présentons ci-après une estimation des flux que l'on peut attendre à l'entrée du spectromètre, lorsque le satellite traverse les régions des maxima de production des deux processus étudiés. FIG. 7.13: Graphiques c et d: Flux des oxygènes suprathermiques intégrés dans un champ de vue de 20° , en fonction de la direction de visée de l'instrument. Graphiques a et b: Taux de comtages attendus en fonction de l'énergie dans le repère de l'instrument pour une angle de visée de 40° par rapport au nadir, au maximum d'activité solaire, en supposant une résolution en énergie de 0.5 eV. Les graphiques (a) et (c) correspondent à la recombinaison dissociative, les graphiques (b) et (d) au criblage. Chaque tracé est relatif à l'altitude d'une orbite circulaire polaire: à 400 km (croix), à 525 km (losanges), à 1050 km (carrés), et à 2100 km (cercels).

La Figure 7.13 montre la variation des flux d'oxygène suprathermique, intégrés dans un champ de vue de 20°, en fonction de l'angle entre la direction de visée et le nadir (graphes a=recombinaison dissociative et b=criblage), au maximum d'activité solaire, à 400, 525, 1050, et 2100 km d'altitude. Rappelons qu'en raison des barrières de potentiel dues à la charge d'espace dans la source, les ions d'énergie inférieure à environ 1eV restent piégés dans cette dernière. De ce fait, les flux représentés correspondent à l'intégration des distributions pour les énergies supérieures à ce seuil.

Le flux intégré obtenu atteint un maximum de $5.7 \times 10^6 \ cm^{-2} s^{-1}$ dans le cas du criblage, et de $7 \times 10^6 \ cm^{-2} s^{-1}$, dans le cas de la recombinaison dissociative. Au minimum d'activité solaire, les valeurs obtenues sont inférieures d'un facteur 2 dans le cas de la recombinaison dissociative, et d'un facteur 50 dans le cas du criblage. Les distributions de vitesse de l'oxygène et du carbone atomiques de la Figure 2.27 de la partie I rappellent que le flux que l'on peut attendre à l'entrée de l'instrument se décompose en une composante quasi maxwellienne, et en une composante suprathermique. Comme le rapport des densités respectives de ces composantes diminue lorsque l'altitude augmente, la direction de visée de l'instrument doit pouvoir évoluer le long de l'orbite de la sonde, de manière à être alignée avec le vecteur vitesse moyen des neutres chauds. L'analyse des variations de ces flux permet en effet de calculer les directions de visées pour lesquelles le flux d'oxygène entrant moyenné sur les deux processus est maximum. Ces directions varient lentement avec l'altitude et correspondent à des angles de $45^{\circ} \ (\pm 5^{\circ})$ (resp. $35^{\circ} \ (\pm 5^{\circ})$) par rapport au nadir, à des altitudes de 400, 525, et 1050km (resp. 2100km).

Si l'on examine l'influence de la direction de visée sur le flux du carbone atomique (Figure 7.14), on obtient, en gardant la même direction de visée que pour l'oxygène, au maximum d'activité solaire, un flux de carbone $4.6 \times 10^5 \ cm^{-2} \ s^{-1}$. Cette valeur est en réalité légèrement inférieure au maximum du flux pour le carbone, qui est de $5 \times 10^5 \ cm^{-2} \ s^{-1}$, et que l'on observe à 400km pour un angle de 55° par rapport au nadir. De même que pour l'oxygène, cet angle se rapproche du nadir lorsque l'altitude augmente. A 400km, la direction obtenue est plus éloignée du nadir (de 10°) que celle correspondant au maximum du flux pour l'oxygène. Enfin, nos simulations montrent également que le flux de carbone ne diminue que très lentement entre 400 et 2000km, ce qui peut éventuellement faciliter la détection de cet élément dans l'exosphère.

Le tableau 7.3 indique les minima et maxima des flux estimés pour chacune des espèces en fonction de l'activité solaire, à 400km. Dans le cas de C et de CO, les flux intégrés issus du criblage sont inférieurs à ceux de l'oxygène d'environ un ordre de grandeur. Dans le cas du CO₂, le flux intégré domine le



FIG. 7.14: Flux de carbone énergétique issus du criblage, intégrés dans un champ de vue de 20°, en fonction de la direction de visée de l'instrument. Chaque tracé est relatif à l'altitude d'une orbite circulaire polaire : à 400km (croix), à 525km (losanges), à 1050km (carrés), et à 2100km (cercels).

Flux maximum à 400 km pour	DR $(O_2^+ \text{ or } CO^+)$ au min/max solaire	Criblage au min/max solaire	
	0		
Energie $(cm^{-2}.s^{-1}.eV^{-1})$	$1.4 \times 10^6 \ / \ 3 \times 10^6 (3.26 eV)$	$3 \times 10^4 / 1.4 \times 10^6 (2.5 \text{eV})$	
Intégré $(cm^{-2}.s^{-1})$	$3.7 imes10^6$ / $7 imes10^6$	$3 \times 10^5 \ / \ 5.7 \times 10^6$	
	C		
Intégré $(cm^{-2}.s^{-1})$	- / $3.6 imes 10^4$	- / 4.6×10^5	
	CO		
Intégré $(cm^{-2}.s^{-1})$	- / 1.25×10^4	- / 7×10^5	
	CO_2		
Intégré $(cm^{-2}.s^{-1})$	- / 1.1×10^4	- / 2.93×10^7	

TAB. 7.3: Amplitude maximale à 400 km des flux de O, C, CO, et CO₂ à l'entrée de l'instrument, dans un champ de vue de 20° FOV, en fonction des processus. La direction de visée fait un angle de 40° avec le nadir.

flux d'oxygène d'un facteur 5, ce qui n'est pas surprenant en raison de la composition atmosphérique dominée elle-même par le CO_2 . En revanche, les flux de CO_2 et de CO calculés diminuent rapidement avec l'altitude (d'un facteur 2 pour CO et 10 pour CO_2 entre 400 et 2000km).



FIG. 7.15: Flux d'oxygène atomique O chaud en entrée de HNA, à 400km, au maximum d'activité solaire, dans le cas de la recombinaison dissociative (rangée inférieure), et du criblage (rangée supérieure). Toutes les énergies sont données dans le repère de l'instrument. (a) et (d): Flux à l'entrée de l'instrument dans le cas d'un champ de vue de 20° (courbe verte) et intégré dans un secteur angulaire de 70° (courbe mauve); (b) et (e): Variation angulaire du flux intégré dans le champ de vue, par rapport à la direction de visée, dont l'anlge par rapport au nadir est de 50° dans le cas du criblage, et de 40° dans le cas de la recombinaison dissociative; (c) et (f): Taux de comptages estimés pour une source d'ionisation de sensibilité égale à 1.7×10^{-2} A/torr. Les lignes en pointillés indiquent la zone de limite de sensibilité du détecteur, entre 1 et 0.1 cps.s⁻¹.



FIG. 7.16: Flux d'oxygène atomique O chaud en entrée de HNA, à 1000km, au maximum d'activité solaire, dans le cas de la recombinaison dissociative (rangée inférieure), et du criblage (rangée supérieure). Toutes les énergies sont données dans le repère de l'instrument. (a) et (d): Flux à l'entrée de l'instrument dans le cas d'un champ de vue de 20° (courbe verte) et intégré dans un secteur angulaire de 70° (courbe mauve); (b) et (e): Variation angulaire du flux intégré dans le champ de vue, par rapport à la direction de visée, dont l'anlge par rapport au nadir est de 50° dans le cas du criblage, et de 40° dans le cas de la recombinaison dissociative; (c) et (f): Taux de comptages estimés pour une source d'ionisation de sensibilité égale à 1.7×10^{-2} A/torr. Les lignes en pointillés indiquent la zone de limite de sensibilité du détecteur, entre 1 et 0.1 cps.s⁻¹.

	Sput 400km	Sput $1000 \mathrm{km}$	$\mathrm{DR}~400\mathrm{km}$	$\mathrm{DR}~1000\mathrm{km}$
Taux max (s^{-1})	1050	140	136	16
Energie max pour $\tau = 0.1 ct. s^{-1}$	$>20\mathrm{eV}$	>20 eV	$>8\mathrm{eV}$	> 8 eV

TAB. 7.4: Comparaison des maxima des taux de comptages obtenus avec une source d'ionisation dont la sensibilité est de 1.7×10^{-2} A/torr.

Les Figures 7.15 (c et f) et 7.16 (c et f) présentent les taux de comptages obtenus en sortie de source, calculés grâce au modèle décrit dans la section 7.2, dans l'hypothèse d'une sensibilité de source de 1.7×10^{-2} A/torr, à partir des flux de neutres présents en entrée de l'instrument, dont on peut voir la distribution en fonction de l'énergie sur les Figures 7.15 (a et d) et 7.16 (a et d) (courbes vertes).

Sur les Figures 7.15(b et e) et 7.16(b et e), nous avons également représenté, pour chaque processus, la variation angulaire du flux, dans un secteur de $\pm 35^{\circ}$ autour de la direction de visée, alignée dans chaque cas avec le maximum du flux, avec une résolution de 5° dans le cas du criblage, et de 2.5° dans le cas de la recombinaison dissociative. Dans le cas du criblage (Figures 7.15 (b) et 7.16 (b)), on remarque que la distribution angulaire obtenue est plus étroite que dans le cas de la recombinaison dissociative, et qu'une augmentation du champ de vue de l'instrument n'entraînerait pas de gain significatif, lorsque la direction de visée est alignée de manière optimale.

Comme on l'a évoqué précédemment, on s'aperçoit que le criblage produit un nombre de coups supérieur à celui dû à la recombinaison dissociative dans ces conditions, ce qui peut être relié au fait que la distribution angulaire est plus étroite dans le cas du criblage et que la direction de visée choisie est plus proche de la direction de la vitesse moyenne. Le tableau 7.4 donne les maxima des taux de comptage obtenus pour les deux altitudes considérées. La sensibilité de source envisagée permet ainsi de mesurer la majeure partie des spectre en énergie attendus, en se plaçant au maximum d'activité solaire, à 1000km d'altitude.

Dans le cas de la recombinaison dissociative, les taux de comptage obtenus pour l'oxygène au maximum d'activité solaire varient de $100cts.s^{-1}$ à $1ct.s^{-1}$, à une altitude de 400km. Le criblage produit des taux de comptage environ 10 fois supérieurs à cette altitude, pour des énergies inférieures à 4eV. Dans le cas du carbone atomique issu du criblage, on obtient un flux intégré proche de $1cts.s^{-1}$, qui demeure constant jusqu'à 2000km. Dans ces conditions d'activité solaire, la détection du carbone, par intégration du flux en énergie dans le champ de vue de l'instrument, est donc potentiellement envisageable même à haute altitude, même si elle demeure très délicate. Il va de soi qu'une augmentation du champ de vue améliorerait la sensibilité de détection du spectromètre (mais un champ de vue de 20° est déjà très difficile à obtenir en pratique). Les flux issus de la recombinaison dissociative en fonction de l'énergie deviennent rapidement moins énergétiques au-dessus de 400km comparés à ceux provenant du criblage, ce qui constitue une caractéristique à exploiter pour l'identification individuelle des processus et la localisation des régions où ils sont prépondérants. Notons qu'au minimum d'activité solaire, la sensibilité adoptée pour la source permet encore la détection des produits de la recombinaison dissociative en combinaison dissociative, et donc la détermination des régions où ce processus est dominant.

En résumé, au minimum d'activité solaire, seul l'oxygène chaud, créé par transfert de quantité de mouvement lors des collisions avec les atomes d'oxygène provenant de la recombinaison dissociative de O_2^+ , est susceptibles d'être détecté, grâce à l'emploi d'une source d'ionisation à forte luminosité telle que nous la décrivons. Dans ces conditions, les gammes de densité correspondantes entre 400 et 1000km sont de [10000-1200] cm^{-3} pour l'oxygène, de [1200-110] cm^{-3} pour CO_2 , et de [800-110] cm^{-3} pour CO. Au maximum d'activité solaire, l'oxygène chaud issu à la fois du criblage et de la recombinaison dissociative apparaît comme détectable, de même que les molécules énergétiques de CO_2 et de CO, pour des altitudes inférieures à 400km. Le flux d'échappement du carbone atomique produit lors du criblage, de l'ordre de $5 \times 10^5 . cm^{-2} . s^{-1}$ au maximum d'activité solaire (flux intégré dans un champ de vue de 20°), est très peu dépendant de l'altitude entre 400 et 2000km, ce qui en fait une cible potentielle de détection, dans le cas où l'on dispose d'un mode de mesure du flux intégré.

Les produits de chaque processus sont caractérisés par des distributions énergétiques distinctes. Dans le cas du criblage la queue énergétique s'étend facilement au-delà de 100eV, en revanche, la partie détectable (constituée par le flux produisant un nombre de coups supérieur au bruit de fond) se situe globalement en deçà de 15 à 20eV. Nous avons également constaté que la partie énergétique de la distribution issue du criblage se dépeuplait moins vite que celle issue de la recombinaison dissociative lorsque l'altitude de la sonde augmente. Une telle caractéristique est intéressante par exemple lorsque le péricentre de la sonde est voisin du point subsolaire (où elle rencontre préférentiellement des produits de la recombinaison dissociative), puisque son altitude augmente au voisinage du terminateur (où elle rencontre préférenciellement des produits du criblage). Enfin, nous pouvons faire référence aux résultats de la première partie, dans laquelle nous avons mis en évidence, concernant l'échelle de hauteur du CO₂ dans l'exosphère, une dépendence nette du processus source, ce qui fournit un critère intéressant de discrimination de ces processus, en particulier au maximum d'activité solaire. Nous avons également évoqué que les variations du contenu de l'ionosphère, ainsi que la direction et l'intensité du champ magnétique interplanétaire, influençaient la localisation des maxima de production des processus de recombinaison dissociative et de criblage. Du côté jour, et plus particulièrement au voisinage du point subsolaire, la recombinaison dissociative est clairement favorisée par rapport au criblage. Du côté nuit, et plus particulièrement au voisinage du terminateur, c'est le criblage qui prédomine. Ainsi, lors du passage de la sonde à travers ces zones disjointes, la mesure des spectres énergétique des neutres chauds devraient offrir une possibilité d'identification indépendante de chacun de deux processus.

7.4.2 Gammes d'énergie et de masse

Le niveau relativement faible des flux estimés pour les différentes espèces, et les différents processus, montre l'intérêt d'effectuer les mesures sur une orbite de bas périapse, de l'ordre de 200km. L'identification par une résolution en masse des espèces lourdes telles que CO et CO₂, produites efficacement lors du criblage au maximum d'activité solaire, est essentielle. Par ailleurs une mesure de hauteur d'échelle du CO₂ pourrait également fournir un moyen de différencier les processus, comme le montre la modélisation de la couronne.

Les mesures de composition réalisées par les sondes Viking ont montré la présence de N_2 (plus importante que CO), Ar, O_2 et NO dans la thermosphère, qui peuvent également s'ajouter à la composante suprathermique de l'exosphère lors du criblage. Par ailleurs la présence d'hydrogène atomique, d'hélium, d'azote et de carbone est également prédite du fait de la faible gravité de la planète, de même que celle du néon, dont la diffusion à haute altitude suit logiquement celle de l'argon.

La recombinaison dissociative d'ions tels que CO_2^+ , et NO^+ , constitue également une source de C, CO, N, et O énergétiques, de même que la photodissociation de CO. Ainsi une détermination complète du spectre des composés de la couronne nécessite un tri en masse dans une gamme s'étendant de 1 à 48 uma, avec une résolution (à mi-hauteur) $\frac{m}{\Delta m}$ de l'ordre de 20, qui permettrait de séparer Ar de CO₂.

Comme on l'a vu, les neutres suprathermiques peuvent être détectés dans une gamme en énergie qui s'étend de 1 à 20eV. Une résolution de 5% à 10% sur cette gamme permettrait de distinguer des détails spécifiques de la distribution issue de la recombinaison dissociative, tels que la présence éventuelle de pics au voisinage des énergies centrales des réactions. La résolution que l'on peut atteindre est limitée d'une part par la dispersion en énergie des ions issus de la source, imposée par les charges d'espace, de l'ordre de 0.5eV, et d'autre part, par la résolution de l'analyseur en énergie lui-même, qui est du même ordre.

Pour des énergies voisines de 2eV à l'exobase, les vitesses moyennes sont essentiellement dues à la vitesse du satellite, de l'ordre de 4 à $5km.s^{-1}$. Si l'on tient compte des effets de la distribution en énergie, on voit facilement pourquoi un spectromètre de masse est indispensable, puisque la résolution d'un analyseur à potentiel retardateur tel que celui de Viking Hanson et al. (1977) ne permet pas de déterminer les masses des ions.

7.4.3 Direction de visée

Les distributions de vitesses présentées au chapitre 2 (cf. Figure 2.27) montrent clairement que les flux de neutres suprathermiques ont des vitesses moyennes dirigées vers le haut. La surface d'entrée de HNA doit donc naturellement être orientée vers la planète, et dans le sens du vecteur vitesse du satellite. Toutes espèces confondues, l'alignement optimal de la direction de visée avec la direction correspondant au maximum du flux est obtenu pour un angle de visée appartenant à un intervalle de $\pm 15^{\circ}$, centré sur un angle moyen de 40° par rapport au nadir. Avec un champ de vue de l'ordre de 20° pour l'instrument, une rotation de la direction de visée permettant de couvrir une plage angulaire de 20° à 60° est suffisante pour couvrir efficacement les distributions sur l'ensemble de l'orbite. Les résultats présentés au paragraphe 7.4.1 donnent une idée globale de la distribution angulaire des flux et de leur variabilité.

7.4.4 Résolution temporelle

La mesure des neutres chauds dans la haute atmosphère de Mars ne pose pas de contraintes particulières au niveau du temps d'intégration, en raison des échelles de temps importantes associées aux processus sources. En effet le rendement de ces processus est sensible en premier lieu aux variations de l'intensité du vent solaire et du flux EUV incident, qui sont typiquement beaucoup plus longues que le temps de passage de la sonde dans les zones d'intérêt. Les productions majoritaires de neutres issus de la photochimie se déroulent au voisinage du point subsolaire avec une décroissance faible en latitude, (l'orbite de la sonde étant a priori polaire), et en première approximation proportionnelle au cosinus de l'angle zénithal en longitude. Concernant le criblage, la zone voisine du terminateur dans laquelle l'intensité du processus est maximale couvre facilement des secteurs de $\pm 10^{\circ}$ en longitude, et de l'ordre de $\pm 10^{\circ}$ en latitude (Modolo et al., 2004), ce qui laisse amplement le temps d'effectuer la mesure. En revanche, en raison de la faiblesse des flux attendus, le spectromètre doit avoir un temps de mesure aussi grand que possible. C'est la raison pour laquelle la possibilité de fonctionnement en continu des émetteurs à effet de champ, que l'on observe, rappelons le, dans le cas de la technologie des cathodes à nanotubes proposée par TRT, est cruciale pour cette mesure. C'est également pour cette raison que nous avons envisagé un spectromètre imageur, qui permet d'obtenir de façon continue le spectre en énergie sur toute la gamme intéressante, doté, en aval de l'analyseur d'énergie, d'un dispositif de tri en masse qui fournit l'information pour chaque ion détecté. Le temps de mesure est donc de 100% et les performances de l'instrument maximales.

En résumé, dans cette troisième et dernière partie, nous avons :

- étudié une optique électrostatique permettant de focaliser le faisceau émis par des cathodes à micropointes dans la source d'ionisation du spectromètre PALOMA, à partir des caractéristiques énergétiques et angulaires mesurées dans la partie précédente,
- développé un modèle simple de la source d'ionisation de HNA, nous permettant de quantifier l'influence du potentiel de charge d'espace électronique sur le faisceau d'ion formé. Ce modèle nous a permis d'étudier un moyen permettant de minimiser la perte de flux due au puit de potentiel formé dans la source, d'évaluer la sensibilité de source, et donc le niveau de courant nécessaire à la détection des neutres chauds dans l'exosphère martienne,
- entamé l'étude des sections d'analyse en énergie et en masse du flux d'ions sortant de la source de HNA,
- évalué les performances du spectromètre et la faisabilité de la mesure des neutres chauds, en fonction des résultats des deux premières parties de la thèse.

BIBLIOGRAPHIE

- Berthelier, J.-J., J.-M. Illiano, R. R. Hodges, J. Covinhes, M. Godefroy, G. Gogly, J. Guillou, and 9 co-autors, 1998: The DYMIO Ion Mass Spectrometer of the Mars 96 Mission. In *Measurement Techniques in Space Plasmas – Particles*, Pfaff, R. F., Borovsky, J. E., and Young, D. T., editors, 215-+.
- Chassefière, E., A. Nagy, M. Mandea, F. Primdahl, H. Rème, J.-A. Sauvaud, R. Lin, S. Barabash, D. Mitchell, T. Zurbuchen, F. Leblanc, J.-J. Berthelier, and 36 co-authors, 2004: DYNAMO: a Mars upper atmosphere package for investigating solar wind interaction and escape processes, and mapping Martian fields. Advances in Space Research, 33, 2228–2235.
- Chassefière, E. and F. Leblanc, 2004: Mars atmospheric escape and evolution; interaction with the solar wind. *Planetary and Space Science*, **52**, 1039–1058.
- Chassefière, E., F. Leblanc, and . co authors, 2005: Was water liquid at the surface of mars at late Noachian? A low-periapsis orbiter to decipher past martian climate. In *Proceedings of the 39th ESLAB Symposium*.
- Covinhes, J., 2006: Paloma. Communication personnelle.
- Duvet, L., 2001: Instrumentation pour l'Etude In Situ des Atmosphères Neutres et Ionisées Planétaires et Cométaires. Thèse de doctorat, Université Paris VI.
- Hanson, W. B., S. Sanatani, and D. R. Zuccaro, 1977: The Martian ionosphere as observed by the Viking retarding potential analyzers. J. Geophys. Res., 82(11), 4351–4363.
- McDowell, 1963: Mass Spectrometry. McGraw Hill Book Company.
- Modolo, R., J.-Y. Chaufray, F. Leblanc, and G. Chanteur, 2004: Impacting flux and associated sputtering effects at Mars. In *35th COSPAR Scientific Assembly*, p 3018.
- Owen, T., K. Biemann, J. E. Biller, A. L. Lafleur, D. R. Rushneck, and D. W. Howarth, 1977: The composition of the atmosphere at the surface of Mars. J. Geophys. Res., 82, 4635–4639.

- Racic, Z., 1996: *Etude et essais du spectromètre à plasma DYMIO de la mission MARS 96.* Thèse de doctorat, Université Paris VI.
- Séran, E., J.-J. Berthelier, F. Z. Saouri, and J.-P. Lebreton, 2005: The spherical segmented Langmuir probe in a flowing thermal plasma: numerical model of the current collection. *Annales Geophysicae*, 23, 1723–1733.
Conclusions et Perspectives

Cette thèse, réalisée au CETP, s'inscrit dans le cadre des travaux initiés par le Pôle Système Solaire de l'IPSL pour l'exploration de Mars. Un des axes de recherches associé à ce thème concerne l'étude de l'atmosphère de la planète et des processus d'interaction avec le vent solaire, avec, in fine, la compréhension de l'évolution à long terme de son environnement. Ce programme implique à la fois des modélisations détaillées des phénomènes, et la mise au point d'expériences nouvelles, avec des capacités que ne peuvent offrir les instruments actuels.

Les travaux entrepris au cours de cette thèse concernent deux domaines très différents, mais complémentaires : d'une part une contribution à la modélisation de la formation de la couronne neutre suprathermique de Mars à partir de processus non thermiques, d'autre part, l'étude d'une instrumentation dédiée à la mesure de cette composante "chaude" de la haute atmosphère.

Dans la première partie de ce travail nous nous sommes attachés à modéliser la formation de la couronne neutre suprathermique à partir d'une atmosphère à symétrie sphérique à l'aide d'une approche particulaire du type Monte Carlo. La première particularité de cette simulation est d'employer un schéma de Dynamique Moléculaire permettant la description précise des collisions impliquant des molécules de l'atmosphère et leurs dissociation éventuelles. La seconde particularité est d'utiliser un modèle numérique commun pour la simulation de deux processus de natures différentes qui sont le criblage, d'une part, et la recombinaison dissociative, d'autre part. Cette caractéristique permet d'établir une comparaison cohérente entre les distributions coronales calculées à partir de chacun des processus, traités habituellement de manière indépendante. Cette approche nous a permis de décrire la structure de l'exosphère et son contenu en constituants "lourds" atomiques ou moléculaires, tels que O et C pour les premiers, et CO et CO₂ pour les seconds. A partir des profils de densité et des distributions d'énergie calculés pour chacun d'eux, nous avons pu mettre en évidence l'existence de populations de constituants moléculaires significatives dans la basse exosphère (c'est-à-dire en dessous de 1000km) quel que soit le niveau de l'activité solaire, composés qui, une fois ionisés, sont aussi susceptibles de prendre part à l'échappement ionique. Nous avons également observé pour la première fois une incidence de la nature des processus sur la hauteur d'échelle du CO_2 énergétique dans l'exosphère. Les résultats obtenus ont permis de souligner et de préciser l'importance du criblage sur le taux d'échappement de l'oxygène et du carbone atomiques dans des conditions de maximum d'activité solaire. Ils ont également permis de quantifier la contribution importante (50%) de l'oxygène issu des dissociations moléculaires à la densité exosphérique totale dans ces conditions. Nous avons également examiné la

variabilité des densités exosphériques en fonction des contenus ionosphèrique et thermosphérique. Des résultats récents montrant la variabilité du contenu de l'ionosphère sous l'influence du flux solaire EUV incident, d'ondes de marées, et du champ magnétique crustal, nous ont alors incité à suggérer l'existence de signatures exosphériques associées à ces phénomènes. Les taux d'échappement cumulés de C, CO, et CO_2 que nous avons obtenus ont permis de montrer que le criblage est au maximum d'activité solaire un processus d'échappement du carbone plus efficace que les sources photochimiques classiquement considérées. Concernant l'oxygène atomique, les échappements ionique et ionosphérique semblent moins efficaces que le criblage au maximum d'activité solaire, et que la recombinaison dissociative quelle que soit l'activité solaire. Enfin, la production et la perte du carbone atomique provenant du CO_2 dissocié lors du criblage ont été étudiées et nous avons pu estimer à environ 60% la proportion de carbone formé qui est perdue par ce biais au maximum d'activité solaire, le reste participant à la dynamique de la haute atmosphère.

En calculant les distributions de vitesses des différents constituants suprathermiques et leur variation avec l'altitude, nous avons également pu indiquer quelles étaient les performances requises pour des spectromètres de masse destinés à l'étude de la couronne suprathermique de l'atmosphère martienne, et, par ailleurs, définir des signatures (échelle de hauteur du CO_2 , étendue et vitesse de décroissance des distributions en énergie, distributions angulaires des flux montants) permettant de différencier le criblage de la recombinaison dissociative grâce à de telles mesures.

Dans la seconde partie, nous avons abordé un travail expérimental : l'étude des dispositifs d'émission d'électrons basés sur l'effet de champ. Une évaluation rapide a montré, en effet, que leurs performances permettent de réaliser des sources d'ionisation dont les sensibilités sont suffisantes pour mesurer les constituants neutres chauds de la couronne martienne, tout en réalisant un gain de plus d'un ordre de grandeur en terme de consommation, par rapport aux sources classiques à filaments chauds. Notre objectif a été de caractériser physiquement le faisceau émis, c'est-à-dire de mesurer les distributions énergétique et angulaire des électrons. Nous avons pour cela conçu et réalisé une instrumentation adaptée et l'ensemble du système informatique de mesure. Celle-ci est constituée d'un analyseur d'énergie hémisphérique à potentiel retardateur, que nous avons modélisé pour en obtenir la fonction de transfert et être capable de remonter aux spectres en énergie des électrons mesurés. Grâce à cet outil nous avons pu caractériser les cathodes à micro-pointes en molybdène fournies par le laboratoire de micro-électronique du LETI/CEA en déterminant les distributions en énergie et en angles sur une large plage de fonctionnement entre 40 et 100eV. Nous avons interprété les distributions observées grâce à un modèle simple décrivant l'influence des deux éléments qui agissent principalement sur ces distributions : la structure électrique interne du composant, et la présence de nanoprotubérances à la surface des pointes. Prenant conscience de l'essor rapide des nanotechnologies basées sur le carbone, nous avons étendu notre étude à quelques tests préliminaires sur des cathodes à nanotubes de carbone provenant du LETI/CEA et du LAAN/TRT, qui nous ont gracieusement été fournies par ces laboratoires. Ces mesures, bien que succintes, se sont révélées prometteuses, d'une part parce que ces composants devraient pouvoir fonctionner en continu, ce qui augmente largement la sensibilité des sources par rapport au fonctionnement pulsé des cathodes à micropointes, d'autre part, parce que les nanotubes de carbone devraient être moins sensibles à des dégradations dues aux constituants

de l'atmosphère ambiante. En outre, les premières observations montrent une distribution en énergie plus étroite des électrons émis que dans le cas des micropointes, ce qui facilite leur focalisation, et le fonctionnement des sources dans des situations particulières.

Dans la troisième partie, nous avons effectué une étude instrumentale, tout d'abord en modélisant deux sources d'ionisation utilisant les composants précédemment étudiés. La première est destinée à un spectromètre de masse classique, PALOMA, dont l'objectif premier est de déterminer les rapports isotopiques des gaz rares à la surface de Mars. La seconde est une source dédiée à la mesure des neutres chauds, pour laquelle nous visons une sensibilité de pratiquement deux ordres de grandeur supérieure à celle des sources classiques utilisées en spectrométrie de masse. Nous avons également abordé la définition du spectromètre de neutres chauds. Au cours de ce dernier travail nous avons en premier lieu quantifié le niveau de courant nécessaire à la détection des populations neutres suprathermiques que nous avons modélisé dans la première partie de la thèse. Ensuite, nous avons étudié un moyen permettant de réduire l'influence du potentiel de charge d'espace dans la source, qui résulte de la densité électronique nécessairement forte du faisceau. Le dispositif que nous avons modélisé permet effectivement de diminuer ce potentiel et rend possible l'extraction des ions de faible énergie formés dans la source. Dans le dernier chapitre nous avons abordé la conception d'un spectromètre en nous appuyant sur une pré-étude réalisée précédemment en collaboration avec l'Université du Texas à Dallas. Ce spectromètre fournit à la fois le spectre en énergie des ions provenant de la source et réalise l'analyse en masse soit à l'aide d'un secteur magnétique, soit par temps de vol. Outre la modélisation de la source, notre travail a consisté à préciser, à partir des résultats de modélisation de la couronne de Mars, et des flux attendus en entrée de l'instrument, les conditions optimales de la mesure, telles que la direction de visée, le champ de vue, la résolution temporelle et spatiale, en fonction des performances de l'analyseur en énergie. Nous avons aussi décrit les caractéristiques principales des deux solutions envisagées pour l'analyse en masse. Ces caractéristiques constitueront la base de l'étude détaillée qui devra mener à la réalisation d'un prototype.

La grande diversité des sujets abordés au cours de cette thèse laisse une marge d'amélioration certaine dans plusieurs domaines.

Sur le plan de la modélisation, la structure de la couronne a été décrite en tenant compte des principales sources de l'oxygène, c'est-à-dire la recombinaison dissociative de l'ion O_2^+ , et le criblage de l'atmosphère par les ions pick-up O⁺ advectés par le vent solaire. Les données actuellement collectées par Mars Express et l'amélioration des modèles décrivant l'écoulement du vent solaire autour de Mars devraient permettre des progrès significatifs dans la définition des flux d'ions implantés non seulement en terme d'intensité, mais aussi en terme de composition et de répartition spatiale.

Dans le cas du carbone, faute de temps nous n'avons pas pu inclure une source d'échappement identifiée dans la littérature qui est la phodissociation de CO. Cet ajout est actuellement en cours. Par ailleurs, une source importante de carbone dans la thermosphère provient de la recombinaison dissociative de l'ion CO_2^+ , et nous pensons intéressant d'inclure cette source, afin notamment de quantifier le flux de carbone provenant de la thermosphère dont le criblage peut provoquer l'échappement.

Enfin, nous pensons qu'un certain nombre d'améliorations possibles de la description de la couronne pourraient être envisagées, par exemple, en prenant en compte d'autres constituants tels que l'azote, ou l'argon. A plus long terme l'étude du fractionnement isotopique lié notamment au criblage s'avérerait sûrement intéressante, en particulier pour les gaz rares. D'un point de vue technique il nous semble également important d'améliorer le traitement des collisions aux énergies proches du seuil de dissociation moléculaire, qui correspondent typiquement aux énergies des produits de réaction issus de la recombinaison dissociative de O_2^+ .

Concernant les sources d'électrons, le travail que nous avons effectué a permis de mieux connaître les caractéristiques des faisceaux d'électrons émis par les cathodes à micropointes, et, de façon très préliminaire, des cathodes à nanotubes de carbone. Dans l'avenir il est probable que c'est sur les cathodes à nanotubes de carbone que se focaliseront les travaux, en raison des caractéristiques très intéressantes de ces dernières, et de l'activité de recherche et développement actuellement très intense sur les nanotechnologies du carbone. Il est clair qu'un important travail reste à faire dans ce domaine pour définir et réaliser des composants optimisés pour les sources d'ionisation, pour les caractériser en détail, et pour développer les sources très performantes que nécessitent certains projets. Les efforts de R&T du CETP financés par le CNES vont dans ce sens.

L'étude des sources que nous avons entamée, a été limitée, faute de temps, à une modélisation. Dans le cas du spectromètre PALOMA, un prototype de source intégrant une cathode à nanotubes doit être réalisé, puis testé, avec en priorité la réduction de la consommation. Un effort devra certainement être porté sur l'optique de focalisation du faisceau, qu'il faut adapter à la nouvelle structure, et il sera intéressant de déterminer le gain en bruit de fond que permettra l'utilisation des sources "froides", par rapport aux sources à filaments chauffés classiques qui provoquent un dégazage intense des parois de la source, et donc un parasitage des mesures par des gaz étrangers à l'atmosphère étudiée.

Dans le cas de l'analyseur de neutres chauds, l'étude par simulation d'optiques électrostatiques peut être poursuivie, avec notamment l'intégration d'une géométrie de source réaliste, incluant des grilles d'épaisseur finie. L'optimisation de l'analyseur électrostatique devra alors être poursuivie, ainsi que les études des différentes possibilités décrites pour le tri en masse, qui posent des problèmes compliqués en raison des très faibles flux attendus nécessitant de ne perdre aucune particule.

En dernier lieu, comme on l'a vu, les objets du Système Solaire dont les environnements comportent une composante neutre suprathermique ne se limitent pas à Mars.

La mesure de cette composante permet de caractériser les atmosphères et/ou les surfaces dont les neutres sont issus et les processus qui leur donnent naissance et, par conséquent, de décrire de façon plus précise les environnements planétaires et comprendre, le cas échéant, leur évolution. Ainsi, le travail effectué au cours de cette thèse, et en particulier sa prolongation, sous la forme de la mise au point de l'instrument HNA, pourrait trouver un champ d'application plus vaste que celui de la seule planète Mars, puisque Europe, satellite glacé de Jupiter, Titan ou Encelade, satellites de Saturne recélant bien des mystères, apparaissent, sur le long terme, comme des objectifs d'un très grand intérêt pour la communauté planétologique.

LA Résultats complémentaires du modèle de couronne suprathermique

Les pages qui suivent présentent dans l'ordre, au maximum d'activité solaire, puis au minimum :

- les distributions de vitesse pour O dans le cas du criblage puis de la recombinaison dissociative,
- les distributions de vites se pour CO_2 dans le cas du criblage puis de la recombinai son dissociative,
- les distributions de vitesse pour CO dans le cas du criblage puis de la recombinaison dissociative,
- les distributions d'énergie pour O, CO₂, CO et C dans le cas du criblage et de la recombinaison dissociative.



FIG. 17: Distribution des vitesses de l'oxygène chaud issu du criblage, à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 400km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



FIG. 18: Distribution des vitesses de l'oxygène chaud issu de la recombinaison dissociative de O_2^+ , à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 400km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



FIG. 19: Distribution des vitesses du CO_2 chaud issu du criblage, à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 400km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



FIG. 20: Distribution des vitesses du CO_2 chaud issu de la recombinaison dissociative de O_2^+ , à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 400km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



FIG. 21: Distribution des vitesses du CO chaud issu du criblage, à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 400km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



FIG. 22: Distribution des vitesses du CO chaud issu de la recombinaison dissociative de O_2^+ , à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 400km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.

















FIG. 26: Distribution d'énergies de O, CO₂, CO, et C, à différentes altitudes, pour le criblage (colonne de gauche) et la recombinaison dissociative de O_2^+ (colonne de droite), au maximum d'activité solaire.



FIG. 27: Distribution des vitesses de l'oxygène chaud issu du criblage, à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 400km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



FIG. 28: Distribution des vitesses de l'oxygène chaud issu de la recombinaison dissociative de O_2^+ , à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 305km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km



FIG. 29: Distribution des vitesses du CO_2 chaud issu du criblage, à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 400km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



FIG. 30: Distribution des vitesses du CO_2 chaud issu de la recombinaison dissociative de O_2^+ , à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 305km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



FIG. 31: Distribution des vitesses du CO chaud issu du criblage, à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 400km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



FIG. 32: Distribution des vitesses du CO chaud issu de la recombinaison dissociative de O_2^+ , à différentes altitudes. Haut gauche: 172.5km, Haut droit: 200km, Milieu gauche: 305km, Milieu droit: 525km, Bas gauche: 1050km, Bas droit: 2250km.



Fig. 33:



Fig. 34:



FIG. 35: Distribution d'énergies de O, CO_2 , et CO, à différentes altitudes, pour le criblage (colonne de gauche) et la recombinaison dissociative de O_2^+ (colonne de droite), au minimum d'activité solaire.

B Système de commande et d'acquisition

La Figure 37 illustre l'architecture fonctionnelle de la chaîne de mesure, de la génération des tensions de consignes aux convertisseurs courant-tension permettant la mesure. L'ensemble a été développé de manière à permettre le contrôle du dispositif au moyen d'une interface programmée simultanément en Labview (cf. Figure 38). Deux cartes National Instruments PC-6013 et PCI-6703 disposant d'entrées et sorties analogiques et numériques permettent le raccordement au boîtier électronique externe qui a été développé pour l'expérience.

Les potentiels des électrodes (32 contacts cathodiques, 32 contacts de grilles, une électrode de blindage, le diaphragme, l'ensemble collecteur et pupille, et l'anneau externe) sont générés par deux jeux de 5 alimentations moyennes tensions fonctionnant dans les gammes $[0 - \pm 180V]$. Deux configurations sont possibles : dans le cas négatif, les grilles sont maintenues à la masse et les pointes sont polarisées négativement, dans le cas positif, les pointes sont maintenues à la masse et le potentiel des grilles est positif. On peut ainsi choisir la meilleure configuration pour l'analyse en énergie, en particulier éviter la présence de potentiels perturbateurs au voisinage du faisceau. La même électronique peut être utilisée lors de tests d'émission en configuration de source, pendant lesquels les grilles sont maintenues à la masse. Les potentiels des 32 colonnes de pointes (resp. grilles) prennent des valeurs ajustables entre 0 et $\pm 120V$. Les sorties de deux ensembles de 32 registres (convertisseurs série/parallèle), chacun commandé par un mot de 32bits, permettent d'affecter à chaque colonne (resp. ligne) son état de fonctionnement. Le rapport cyclique choisi est reproduit par le timer programmable de l'une des cartes (signal 0-5V), qui permet de synchroniser les sorties des convertisseurs série/parallèle. Les potentiels de polarisation du collecteur, du diaphragme, et des anneaux, sont indexés sur les sorties des 3 alimentations reliées directement aux électrodes. Un second signal d'horloge provenant de PC permet de synchroniser les mesures au signal appliqué à la cathode (la fréquence d'échantillonage est de 50kHz). Toutes les alimentations sont commandées au moyen des sorties analogiques 0-10V codées sur 16 bits (0-4V utiles) provenant du PC.

Les courants émis et reçus transitent par des convertisseurs (extérieurs à l'enceinte) composés de plusieurs étages. Chaque étage correspond à un convertisseur courant-tension ou courant-courant entouré d'un blindage électro-magnétique. Les étages suivant immédiatement les électrodes disposent d'une référence flottante au potentiel de polarisation de l'électrode traversée par le courant à mesurer. La Figure 36 illustre le principe de fonctionnement du convertisseur courant-tension placé en aval du collecteur ou de la pupille. Une isolation optique est placée entre les étages de conversion courant-



FIG. 36: Schéma de principe du convertisseur courant-tension relié au collecteur et à la pupille. MF désigne la masse flottante réalisée ici à partir d'un suiveur alimenté par des piles de 9V (non montré ici). L'amplificateur haute impédance assure que l'intégralité du courant collecté est transmise au convertisseur courant-tension à l'aide d'un optocoupleur.

courant et courant-tension reliés au boîtier de commande.

Sources	Gammes d'entrée	Gammes de sortie	Temps de réponse
Ipointes	$10 \mu A/30 m A$	10mV/10V	$500 \mu s$
Idiaph	$\pm 1(30)\mu A/\pm 1(30)mA$	10mV/10V	$500 \mu s$
Icoll	$-100pA/ - 100nA$ // $-1nA/ - 1\mu A$	10mV/10V	$500 \mu s$
Ipupille	-5pA/-1nA	10mV/10V	$500 \mu s$

TAB. 5: Gammes d'entrée-sortie des amplificateurs mis au point et employés pour la mesure des courants.

Les gammes de courant associées aux mesures effectuées sur les différentes électrodes (collecteur, pupille, diaphragme, cathodes, grilles, blindage) sont répertoriées dans le tableau 5. Les temps de réponse des convertisseurs sont de l'ordre de $500\mu s$. La durée des pulses de la tension d'extraction appliquée à la cathode est toujours prise supérieure à 1ms, rendant possible l'emploi ponctuel d'un mode d'échantillonage monocoups. En général, la mesure est réalisée par un échantillonnage multicoups, à partir desquels on détermine la valeur moyenne du courant puis la valeur maximale en tenant compte du rapport cyclique. Le courant émis par les cathodes est mesuré dans la gamme $10\mu A - 30mA$ par un convertisseur placé entre la masse et le niveau commun bas des registres commandant les 32 colonnes de pointes. Le courant collecté (collecteur ou pupille) est mesuré dans la gamme $10pA - 1\mu A$ à l'aide d'un convertisseur courant-courant unidirectionnel (courant d'électrons entrant), flottant (alimenté par une pile de 9V), isolé optiquement, suivi d'un convertisseur courant-tension (gamme 10mV-10V). Au niveau du diaphragme la chaîne de mesure est plus complexe en raison de l'existence du pont de polarisation des anneaux qui ajoute au courant d'électrons collecté le courant circulant dans le pont. De ce fait un système à trois étages (convertisseur I-U flottant, convertisseur U-I bidirectionnel optiquement isolé, convertisseur I-U) est employé. Les courants collectés par les autres électrodes (blindage ou grilles) peuvent être mesurés si nécessaire à l'aide des convertisseurs précédents, mais en

raison d'une limitation dans le nombre de modules disponibles ces deux dernières mesures ne peuvent pas être réalisées en permanence. Enfin, le courant mesuré est une valeur moyenne sur l'échantillonnage effectué pendant un nombre de périodes réglables (pris supérieur ou égal à 4).



FIG. 37: Fonctions principales de l'électronique de commande et d'acquisition. En fonction des paramètres choisis au niveau de l'interface de contrôle (cf. Figure 38), la configuration de la matrice de pixels, la durée et l'amplitude des pulses, et les niveaux de tensions appliqués aux différentes électrodes sont transmis par le PC à l'électronique externe. Les signaux de courants sont amplifiés et convertis en tensions transmises au PC par un couplage optique permettant d'éviter les dégradations liées au différentiel des références.



FIG. 38: Interface de contrôle développée en Labview. Les paramètres ajustables concernent la configuration de la matrice (choix des éléments émetteurs), l'amplitude et la durée des pulses, les niveaux de tensions fixes (diaphragme, blindage), les rampes de tensions appliquées au collecteur/pupille lors d'une analyse en énergie, et la durée de l'échantillonage (la fréquence est fixée à 50kHz).

$\Box C$ Conduite du projet de thèse

Contexte de la thèse

L'équipe instrumentale du département EMI (Etude des Milieux Ionisés) du CETP développe des capteurs dédiés à l'étude des plasmas planétaires (capteurs de champ électrique, spectromètre à plasmas). Le personnel technique permanent est composé de deux ingénieurs électroniciens, de deux ingénieurs de recherche, d'un dessinateur industriel, et d'un nombre variable de stagiaires et CDD. Quatre projets majeurs ont occupé l'ensemble du potentiel de l'équipe, depuis mon arrivée en thèse: la réalisation d'un prototype de spectromètre de masse dédié à la mesure de rapports isotopiques de gaz rares à la surface de Mars (PALOMA), des validations de capteurs de champ électrique pour le satellite DEMETER, et la réalisation de deux expériences ballons: ARES pour la mesure du profil de champ électrique dans l'atmosphère, et HASI, simulant la mesure du champ électrique pendant la descente du module Huyghens sur Titan. Le développement correspondant à ma thèse (HNA pour Hot Neutral Analyser) s'est trouvé relativement en marge des thèmes centraux du fait de l'abandon par le CNES d'un projet d'orbiteur martien (MARS PREMIER) susceptible d'embarquer l'instrument, dont le décollage était prévu pour 2007. J'étais ainsi la seule personne du laboratoire à travailler à plein temps sur cet objectif. Le projet HNA s'inscrit dans une démarche de R&D destinée à développer un prototype d'analyseur de gaz (mesure de masse et d'énergie) utilisant une technologie issue de la microélectronique, encore jamais employée pour ce type d'expérience embarquée. Il s'agit d'une phase de pré-étude centrée sur la caractérisation de la source d'électrons à la base de ce nouvel instrument, effectué en collaboration avec deux laboratoires de recherche français en micro et nano électronique, le LETI (CEA) et le LAAN de TRT (Thales Research and Technology).

Une concurrence certaine est présente sur le plan international pour le transfert dans le domaine spatial de ce type de technologie (USA, Suède, Allemagne, Angleterre, Japon), avec une certaine avance des laboratoires spatiaux américains. Les moyens humains consacrés par le CETP à ce projet sont (voir la répartition dans le tableau du budget):

- un thésitif à temps complet,
- un chercheur responsable scientifique/instrumental,
- un chercheur responsable scientifique,
- un ingénieur de recherche,
- un électronicien,

- un dessinateur.

Aucun moyen technique (personnels mis à part) n'existait au laboratoire avant le début de la thèse. Pour commencer l'étude, la première étape a consisté à se doter de tels moyens : j'ai mis en place un dispositif de caisson à vide permettant d'effectuer des tests sous un vide poussé, puis j'ai conçu et réalisé l'instrument permettant de faire les mesures. Sur le plan technique, l'objectif premier était donc de mener à bien la caractérisation de sources d'électrons de type cathodes à micro-pointes. Deux contraintes pratiques prépondérantes ont influencé l'avancée des travaux : les délais de fabrication et de livraison des différents ensembles, et la lourdeur de la mise en œuvre d'une expérience de laboratoire de ce type sous ultravide. L'idée initiale était d'effectuer en parallèle la simulation numérique des différentes parties de l'instrument d'analyse des gaz atmosphériques (spectromètre de masse), ainsi que la modélisation des populations de particules visées par la mesure (sur Mars), et enfin de réaliser un prototype de l'instrument.

Déroulement, gestion et coût du projet

Préparation et cadrage du projet

Je me suis organisé de manière à effectuer en complémentarité (et en parallèle) les travaux expérimentaux et théoriques, ces derniers permettant de prévoir les difficultés, d'orienter les mesures, et de les interpréter. Un risque important concernait les possibilités de destruction des composants lors de leur préparation, de leur mise en place ou de leur utilisation sous vide en conditions dégradées. La stratégie suivie a été de définir, en collaboration avec le CEA, un processus d'utilisation hors salle blanche, afin de sécuriser l'utilisation des composants et de permettre leur fonctionnement en régime nominal. D'autre part certains glissements de calendrier inévitables, en raison de délais de fabrication et d'approvisionnement des composants, ont été mis à profit pour travailler et avancer sur les aspects de modélisation numérique de l'expérience et de modélisation atmosphérique. Initialement seule la technologie des cathodes à micro pointes était suffisamment avancée pour envisager la construction d'un prototype de source d'ionisation. Dans le courant de la thèse, les nanotechnologies émergeantes évoluant très vite, nous avons pris conscience du fait que ce dernier type de technologie présentait un intérêt certain vis-à-vis de notre application. Nous avons donc décidé d'inclure également ce type de technologie dans notre procédure de test.

Partenariats

Le projet s'est déroulé en collaboration avec deux partenaires industriels (ou semi-industriels) nationaux : le laboratoire du CEA/LETI (Laboratoire d'Electronique de Technologie de l'Information), développant et fournissant de cathodes à micro-pointes et à nanotubes de carbone, et le TRT/LAAN (Laboratoire d'Analyses Avancées et Nanostructures), développant également des cathodes à nanotubes de carbones. Les contacts avec le LETI étaient déjà bien établis lors de mon arrivée en thèse, un contrat ayant déjà été passé pour la fourniture de cathodes froides au laboratoire. Prenant par ailleurs connaissance, dans la littérature spécialisée, du développement rapide et prometteur de composants similaires issus des nanotechnologies, et suite à quelques discussions avec des spécialistes du domaine sur l'intérêt d'utiliser ces avancées dans le cadre d'expériences embarquées, j'ai pu initier un contact avec le LAAN, qui a permis par la suite de développer une phase de pré-étude de prototypes issus de leur technologie. D'une manière générale ces partenaires ont été choisis en raison de leur expertise internationale dans le domaine des micro et nanotechnologies, et l'interaction relativement aisée avec leurs services. Les travaux concernant les technologies d'émissions à base de micro-pointes et nanotubes revêtent un aspect confidentiel du fait de leur importance pour des marchés d'applications tels que la réalisation d'écrans plats.

Conduite du projet

La fréquence des réunions d'avancement avec mon responsable de thèse ou les différentes parties de l'équipe n'était pas vraiment fixée. Les réunions étaient plutôt sollicitées en fonction des besoins: difficultés techniques ou autres, discussions sur des résultats de mesures ou préparation de réunions/conférence. Les entrevues informelles avec l'ingénieur de recherche m'aidant à la réalisation de l'expérience étaient fréquentes, (plusieurs fois par semaine) surtout en début de thèse, à la demande de l'un ou de l'autre. Pour la partie scientifique les contacts étaient également fréquents par mail/téléphone, complétés par des réunions de travail (environ une fois tous les quinze jours/trois semaines). D'autre part le cofinancement de ma bourse par le CNES m'obligeait à fournir une fois par an à ce dernier un descriptif d'activité (document de trois pages). Le suivi de partenariats industriels était plus structuré et imposait de solliciter des réunions espacées mais régulières (une fois/6mois). En fonction de cela il m'a été utile de planifier le travail de manière à obtenir des résultats partiels permettant d'identifier les problèmes non pressentis, tout en répondant à la nécessité de montrer que les choses avançaient. Des contacts fréquents par mail/téléphone ont eu lieu lorsque certains points techniques spécifiques devaient être abordés. Les relations avec les sous-traitants étaient, quant à elles, épisodiques, dépendant du calendrier de réalisation et de commande. Les principaux problèmes rencontrés l'ont été sur le plan expérimental lors de la mise en place pas à pas de l'expérience de mesure des performances des cathodes : délais de livraisons (maximum 6mois pour un élément du caisson) ou de réparation importants à l'échelle d'une thèse (notamment des éléments de pompages), pérennisation d'un caisson à vide poussé (gestion des fuites), lourdeur de l'expérience (4 jours de préparation en place avant de pouvoir effectuer une mesure). Les temps morts ont été en général comblés par du travail de simulation numérique et de modélisation.

D'autre part certains aspects du comportement des cathodes du LETI étaient délicats à cerner, notamment du fait de l'inexpérience du laboratoire vis-à-vis de certains problèmes (les problèmes rencontrés étaient bien sûr souvent nouveaux, y compris pour le fabricant). Par ailleurs si la documentation standard ne laissait pas transparaître certains problèmes potentiels, ou ne fournissait qu'une information partielle, il est souvent apparu que plus d'informations fiables pouvaient être obtenues lors d'échanges directs avec mes interlocuteurs.

Pendant la première phase de ma thèse (d'octobre 2002 à décembre 2003), j'ai travaillé à la constitution de l'expérience de caractérisation en collaboration avec un ingénieur de recherche du CETP, ainsi qu'à son montage et à sa simulation. J'ai d'autre part pu travailler en collaboration avec un ingénieur électronicien, qui m'a apporté un support technique important lors de la réalisation de l'électronique de mesure, et de la programmation de l'interface de contrôle du banc de test. A partir de fin 2003, début 2004, ce support m'a permis de terminer la phase de modélisation de l'expérience et de préparer l'interprétation des résultats de mesures. J'ai alors pu entamer le travail de modélisation atmosphérique en collaboration avec François Leblanc, un chercheur de Service d'Aéronomie de Jussieu, ainsi qu'un travail de simulation de source d'ionisation pour le projet PALOMA. Une fois l'expérience stabilisée (environ juin 2004), j'ai organisé mon temps de travail en menant toujours deux activités complémentaires en parallèle : périodes de mesures expérimentales/simulations diverses (atmosphère, instrument HNA) ou simulation diverses/interprétation des mesures et rédaction. A cela s'ajoute à partir de mai 2005 l'adaptation du système expérimental, notamment à la suite de notre décision d'inclure les cathodes à nanotubes de carbone dans la série de tests envisagés, puis les mesures en question.

Evaluation et prise en charge du coût du projet

Salaires	Fonction(*)	Durée (mois)	Salaire Net	Charges salariales	Charges patronales	Total
Interne	Thésitif	36	140	0 300	570	8172
	DR HC CNRS	1	524	0 1120	2200	8560
	IRHC CNRS	2	2 433	4 920	1800	14108
	IE 1CNRS	3	300	0 640	1200	14520
	Technicien CNRS	2	2 200	0 420	008 (6440
	CR1 CNRS	2	370	0 790	1500	11980
						137328
Matériels neufs	Prix d'achat HT	Temps utilisé	Quote part d'amortissement(sur 10ans)		
Emetteurs d'électrons	30000) X				
Eléments bâtis UHV + Groupe de pompage	38200	30	955	0		
Spectromètre de masse	10200	30	255	0		
Composants mécaniques et réalisation	11300	X	5			
Composants électroniques et réalisation	6700	x X				
Cartes d'acquisitions	1800	30) 45	0		
Ordinateurs	4000	X	(
Logiciels + Licences	1100	30) 27	5		
Total	103300		1282	5		12825
Consommables	530					530
Matériels anciens	Valeur de remplacement		Quote part d'amortissement			
Oscilloscope	3000		285	0		
Keithley	12000		1140	0		
Générateurs de signaux	4600	l .	437	0		
and a second	19600		1862	0		980
Infrastructures						
Azote sec	200					200
Salle de manip (électricité …)	1500					1500
Documentation				1	1	1
commande d'articles	400					400
Missions/Déplacement	2000					2000
Cout total						15576

*:DRHC=Directeur de Recherche Classe 1 CR1=Chargé de Recherche Classe 1

FIG. 39: Evaluation et prise en charge du coût du projet

Conduite du projet de thèse

228

Compétences, savoir-faire, qualités professionnelles et personnelles

Tout au long de ma thèse j'ai pu développer des compétences et savoir-faire dans les domaines cités ci-après.

Sur le plan technique :

-Mise en œuvre de méthodes numériques de type Monte Carlo dans un cadre de dynamique des gaz en régime cinétique (utile en aéronautique en particulier),

-Simulation numérique d'instruments utilisant des optiques électrostatiques et magnéto statiques. Simulation de mesures à partir d'un instrument embarqué sur une sonde spatiale, en orbite autour d'une planète.

-Mise en œuvre d'émetteur à effet de champ types cathodes à micro pointes et à nanotubes, problèmes associés. La maîtrise de ce genre de micro- et nano- technologies est loin d'être achevée et constitue un sujet de recherche en plein essor pour les laboratoires cherchant à développer de nouvelles applications dans le domaine de l'électronique (écrans plats, tubes à onde progressive,...). La manipulation et l'étude de tels systèmes a demandé des précautions de mise en œuvre tout à fait spécifiques (notamment pour éviter les sources de pollution), l'acquisition de compétences en physique de l'effet de champ à la base de l'émission d'électrons, et la prise en compte des divers phénomènes dégradant leur fonctionnement : bombardement ionique, adsorption polluante. L'ensemble de ces savoirs a été nécessaire à la construction d'un modèle numérique permettant d'interpréter les résultats de mesure.

-Mise en œuvre d'une expérience sous ultra-vide, techniques et problèmes associés. Sur un plan plus technique j'ai pu acquérir les compétences nécessaires à la conception et à la réalisation d'une expérience de physique dans un environnement ultra-vide. Une telle expérience demande d'exploiter des connaissances de base en sciences de l'ingénieur, mécanique, électronique, informatique, et revêt un aspect critique quant à la mise en place d'un vide poussé, avec en plus dans notre cas la mesure de courants très faibles (pA) dans des conditions de perturbations importantes.

Sur le plan scientifique:

-Modélisation physique de phénomènes étudiés liés à l'émission de champ et aux faisceaux denses de particules chargées : émission de champ, effets de charge d'espaces (publication des résultats de caractérisations des émetteurs).

-Processus de physique atmosphérique : criblage atmosphérique, recombinaison dissociative, liés à la thématique de l'échappement atmosphérique.

-Physique exosphérique (milieu très peu dense, en interaction avec le vent solaire)

-Planétologie, sur la thématique de l'échappement atmosphérique (présentation de résultats de simulation lors d'un congrès international (EGU), et publication dans un article de revue à comité de lecture), et en particulier sur la problématique du bilan d'eau à l'échelle planétaire.

La planétologie est un domaine vaste à la croisée de multiples champs scientifiques: physique et chimie des atmosphères, géologie, astronomie et astrophysique, et maintenant, biologie. L'environnement de travail est extrêmement riche et permet d'acquérir des connaissances très complémentaires dans ces différents domaines, y compris au niveau des différentes méthodes instrumentales employées. J'ai pu également acquérir des connaissances dans le domaine plus général concernant les propriétés et applications des micro et nanotechnologies, domaine relativement nouveau pour moi avant cette thèse.

Sur le plan organisationnel : tout au long de ma thèse j'ai dû apprendre à mener en phase des activités diverses (expérimentales et de modélisation), ce qui m'a obligé à cibler des axes de travail dans chaque domaine (mesures, instrument, atmosphère) et à définir des objectifs intermédiaires me permettant de passer d'un sujet à l'autre tout en avançant à un rythme cohérent avec les contraintes de temps imposées par la thèse. En particulier j'ai réalisé combien, quel que soit le domaine, la phase de pré-étude était nécessaire et permettait d'évaluer les chances de résultats pour un problème posé. J'ai aussi appris à gérer l'imprévu (pannes matérielles notamment) et les temps morts en composant entre les différents domaines d'étude. Enfin j'ai acquis la rigueur nécessaire à l'approche d'un problème (scientifique ou technique) et à la mise en œuvre de solutions adaptées. J'ai par exemple fait évoluer la structure géométrique du code de calcul atmosphérique de manière à décrire de manière plus réaliste les trajectoires de particules, ce qui permet de fournir des informations plus pertinentes vis-à-vis de la mesure envisagée.

Sur le plan relationnel : J'ai appris combien la qualité des interactions humaines pouvaient influer sur celle du résultat et combien l'avancement d'un projet dépend, en plus des compétences techniques et scientifiques nécessaires, essentiellement de la motivation des différents acteurs et de leur envie de travailler ensemble. Etant la seule personne impliquée à 100%, j'ai toujours eu l'initiative de débattre de tel ou tel point avec les différentes personnes. Concernant l'étude des cathodes à micro-pointes j'ai communiqué régulièrement mes résultats au LETI ou au LAAN, ainsi que les problèmes rencontrés, ce qui m'a permis de mettre en perspective leur savoir-faire pour orienter la conception mécanique et électronique de l'expérience (choix des matériaux et des composants idoines) ainsi que la façon d'effectuer les mesures (prise en compte des problèmes potentiels liés à la présence d'électrons secondaires par exemple), et enfin de diagnostiquer certains problèmes importants vis à vis de leur utilisation dans un instrument embarqué (nécessité de travailler en mode pulsé, difficultés d'utilisation sans étuvage). La réalisation de cette expérience et les résultats obtenus m'ont permis de prendre contact avec une autre équipe du LETI ainsi qu'une équipe de Thales, toutes deux développant des cathodes à nanotubes de carbone, et de les intéresser à la réalisation des tests similaires sur leur composants. Les différents acteurs ont adhéré à notre démarche, ce qui nous a permis de bénéficier généreusement d'échantillons pour effectuer les tests, et d'envisager de nouveaux contrats par la suite. Sur un autre plan j'ai évidemment profité de conférences ou de séminaires pour me faire connaître et rencontrer des spécialistes du domaine scientifique d'intérêt.

Sur le plan décisionnel et d'orientation du projet : C'est avant tout sur le plan technique (de modélisation ou expérimentale) que j'ai pu faire preuve dans une certaine mesure de capacités de décision et d'orientation. D'autre part j'ai personnellement souhaité développer le plus possible l'aspect thématique du projet par la collaboration avec un chercheur du Service d'Aéronomie sur la modélisation atmosphérique, étant décidé à travailler dans le domaine de la planétologie par la suite. J'ai également choisi d'orienter la partie expérimentale vers la caractérisation de nouveaux émetteurs plutôt que vers la réalisation d'un prototype de source, considérant d'une part que les principaux problèmes potentiels pouvaient être ciblés par l'expérience de caractérisation des sources et par le test de leur fiabilité suivant l'état actuel des technologies, et d'autre part que l'évolution rapide de ces technologies demandait une adaptation concrète de notre procédure de test.

Résultats, impact de la thèse

Au niveau du CETP, le banc de tests d'émetteurs d'électrons réalisé et utilisé au cours de ma thèse n'existait pas auparavant. Ce banc fonctionne de manière nominale et permet d'envisager différents types de mesures sur d'autres types d'émetteurs. Vis-à-vis du CNES, financeur de ma bourse et d'une action de R&T engagée sur les nanotubes, le retour des tests effectués sur deux technologies « concurrentes » servira à révéler les principaux défauts et qualités de chaque type de technologie, permettant ainsi d'orienter notre préférence. La simulation instrumentale a permis de définir et de sélectionner les méthodes de tri en masse et en énergie, qui seront appliquées par la suite pour la réalisation d'un prototype d'instrument. Le laboratoire sera ainsi en mesure de construire un prototype permettant de répondre à un appel d'offre de l'ESA ou de la NASA. La modélisation des processus atmosphériques martiens a permis d'une part de spécifier les caractéristiques de l'instrument, et d'autre part de décrire la couronne neutre chaude martienne en géométrie sphérique sur le plan moléculaire et pour différentes activités solaires, ce qui n'avait pas été fait auparavant. Le choix d'une technologie se décline naturellement par la pérennisation de nos contacts avec l'un des laboratoires industriels, qui deviendra par la suite partenaire «officiel» vis-à-vis du CNES, maître d'œuvre des projets spatiaux. Pour ma part le choix de chercher un projet de recherche en post doctorat s'est fait de manière naturelle, étant donné mon souhait de continuer à travailler dans le domaine de la planétologie, sur des aspects plus thématiques (analyse de données ou modélisation). A ce jour cette recherche se traduit par des contacts établis principalement avec deux laboratoires spatiaux, en Hollande (l'ESTEC avec un séminaire prévu pour appuyer ma candidature) et aux Etats-Unis (University of Virginia, Charlottesville).

____D Articles issus de la thèse

Α

Martian corona: non thermal sources of hot heavy species, **F. Cipriani**, F. Leblanc, J.J. Berthelier, JGR Planets, 2007

Β

A new hemispherical energy analyzer to characterize field emitters, **F. Cipriani**, F. Leblanc, J.M. Illiano, J.J. Berthelier, to be submitted to Review of Scientific Instruments, 2007

С

Physical Characterization of the Electron Beam Emitted by Space Oriented Field Emitter Arrays: case study of Mo microtips cold cathodes, **F. Cipriani**, F. Leblanc, J.M. Illiano, J.J. Berthelier, F. Muller, to be submitted to Journal of Physics D: Applied Physics, 2007