



Étude et développement d'un spectromètre de masse et énergie : modélisation et optimisation de l'optique, réalisation du prototype

Joël Becker

► To cite this version:

Joël Becker. Étude et développement d'un spectromètre de masse et énergie : modélisation et optimisation de l'optique, réalisation du prototype. Instrumentations et Détecteurs [physics.ins-det]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2013. Français. NNT : . tel-00905315

HAL Id: tel-00905315

<https://theses.hal.science/tel-00905315>

Submitted on 18 Nov 2013

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.

THÈSE

PRÉSENTÉE A

L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

ÉCOLE DOCTORALE : Ecole doctorale ED 127 Astronomie et Astrophysique d'Île-de-France

Par **Joël Becker**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : Physique des plasmas - plasmas spatiaux

**Etude et développement d'un spectromètre de masse et énergie :
modélisation et optimisation de l'optique, réalisation du prototype**

Directeur de recherche : François Leblanc

Co-directeur de recherche : Jean-Jacques Berthelier

Soutenue le 19 Septembre 2013.

Devant la commission d'examen formée de :

Mme L. Rezeau	Professeur	Présidente du jury
Mr K. Torkar	Professeur	Rapporteur
Mr J.A. Sauvaud	Directeur de recherche	Rapporteur
Mr R. Thissen	Chargé de recherche	Examineur
Mr J.P. Lebreton	Responsable scientifique	Examineur
Mr F. Leblanc	Directeur de recherche	Directeur de thèse
Mr J.J. Berthelier	Directeur de recherche	Co-directeur de thèse

Remerciements

Ce mémoire présente mes travaux de thèse réalisés au Laboratoire atmosphères, milieux, observations spatiales (LATMOS UMR 8190) au sein de l'équipe «Héliosphères, Exosphères Planétaires, Plasmas et Interfaces». Cette thèse a été co-financée par le CNES et le CNRS. Je tiens en premier lieu à remercier Madame Danièle Hauser, directrice du LATMOS de m'avoir accueilli dans le laboratoire.

J'exprime ma très sincère reconnaissance à mes directeurs de thèse, François Leblanc et Jean-Jacques Berthelier, pour avoir assuré la direction de ce travail, et pour m'avoir apporté la rigueur scientifique nécessaire à son bon déroulement. J'ai particulièrement apprécié leur disponibilité, leurs conseils et leur sympathie. Je remercie François Leblanc pour sa motivation et son attention pour me faire comprendre la science des exosphères, sa patience pour les multiples corrections de ce manuscrit et entraînements à la soutenance. Je remercie Jean-Jacques Berthelier pour m'avoir rapidement confié des responsabilités et pour m'avoir fait confiance même lorsque j'empruntais le mauvais chemin. J'exprime ma gratitude pour toute son expérience dont j'ai pu profiter pendant ces trois années de thèse.

A Madame la Professeur Laurence Rezeau, j'exprime ma gratitude pour avoir accepté de présider le jury de cette thèse. Je souhaite également exprimer ma profonde reconnaissance à Messieurs Jean-André Sauvaud et Klaus Torkar pour avoir examiné mon travail en tant que rapporteurs de cette thèse, pour l'intérêt qu'ils ont manifesté à l'égard de ce travail et pour leurs appréciations. Je remercie Roland Thissen d'avoir participé au jury de thèse mais aussi pour ses commentaires sur mon travail qui m'ont permis d'améliorer grandement mon manuscrit. Je remercie Jean-Pierre Lebreton d'avoir complété le jury de cette thèse et m'avoir apporté ses corrections.

Je remercie toute l'équipe d'électroniciens du laboratoire, notamment Aude-Lyse Millet, Laurent Lapauw et Jean-Pierre Pineau pour m'avoir aidé à concevoir le prototype de l'instrument, d'avoir travaillé sur la conception du détecteur. Je remercie en particulier Jean-Pierre de m'avoir rendu l'électronique intelligible.

Je tiens à remercier François Danis pour m'avoir appris à travailler dans une salle de manips. Je le remercie pour son savoir qui s'étend sur plusieurs domaines et dont j'ai pu profiter pendant une année. Je remercie Pierre Gilbert qui nous a permis de concevoir le prototype en réalisant les plans de fabrication. Je lui exprime ma gratitude pour ses explications et son attention lors des montages en salle blanche.

Je tiens aussi à remercier le Professeur Soonil Lee et le post-doctorant Nguyen Tuan Hong de m'avoir accueilli à Suwon, d'avoir contribué au projet et de m'avoir fait découvrir la Corée du Sud. Je voudrais également remercier l'équipe du LPP de Saint-Maur avec qui j'ai travaillé pendant une année. Le cadre paisible et verdoyant du labo m'a permis de faire de belles rencontres comme Xavier et Christophe, avec qui je me confrontais parfois au ping-pong. Je tiens à remercier Frédéric Leblanc pour ses conseils mais aussi Jean Covinhes qui m'a tout appris sur l'utilisation du logiciel SIMION et pour ses conseils lors du développement du modèle de PICAM.

Je ne saurais oublier mes amis et proches pour leur présence et leur soutien : Jessica, Emilie, Gilles, Steeve, Max, Damien, Charlotte, Cyril, David, Antoine, Nico. Je remercie ma famille et tout d'abord mes parents pour m'avoir toujours soutenu et pour avoir cru en moi : je vous dois aussi la réussite de mes études. Je remercie mon frère Jérôme et ma soeur Tania ainsi que leurs familles respectives.

Le dernier paragraphe de mes remerciements s'adresse à ma femme : Julie. Merci pour m'avoir soutenu durant ces années de thèse loin de nos proches et de nos familles. Merci de m'avoir supporté et écouté.

Résumé

L'objectif de mon travail a été de développer, réaliser et tester un spectromètre de masse neutre permettant d'étudier les exosphères planétaires : NIMEIS (Neutral and Ion Mass and Energy Imaging Spectrometer). Les particules présentes dans les exosphères planétaires peuvent s'interpréter comme la signature des processus d'interaction entre l'environnement des objets planétaires et leur atmosphère et/ou surface. Un instrument de mesure, capable de déterminer la masse et l'énergie des particules de l'exosphère a été développé afin d'identifier et caractériser ces processus.

Un modèle numérique d'un spectromètre de masse et d'énergie pour la mesure des neutres et ions exosphériques a été développé afin de répondre aux objectifs instrumentaux imposés par notre connaissance de ces processus. A partir du modèle numérique obtenu, un prototype a été réalisé et des tests ont été effectués.

En parallèle, j'ai travaillé sur le développement d'une source d'ionisation, également nécessaire au fonctionnement optimal du spectromètre de masse neutre, basée sur l'utilisation de nanotubes de carbone comme émetteurs d'électrons. Nous travaillons en collaboration avec un laboratoire Sud Coréen qui produit les nanotubes de carbone. Mon travail a permis de définir, concevoir et modéliser différents types de dispositifs pour parfaire l'extraction des électrons.

J'ai également travaillé sur la définition et l'optimisation du modèle numérique de l'optique de l'instrument PICAM (Planetary Ion CAMera). PICAM est un spectromètre de masse d'ions de la mission Bepi-Colombo ayant pour objectif d'étudier l'exosphère ionisée de Mercure. La particularité de cet instrument est de mesurer la masse, l'énergie des ions et de produire une image instantanée d'un champ de vue hémisphérique. L'optimisation du modèle s'est faite à partir d'un modèle numérique en partant du design de l'instrument DION de la mission Phobos-Grunt (Vaisberg et al. 2010). L'objectif de cette optimisation a consisté en la recherche d'une augmentation du facteur géométrique, indispensable pour la mesure de très faibles densités dans le cadre de l'exploration de Mercure.

Abstract

The objective of my work was to develop, implement and test a neutral mass spectrometer to study planetary exospheres, NIMEIS (Ion and Neutral Mass and Energy Imaging Spectrometer). The particles in the planetary exospheres are signatures of the interaction between the environment and the atmosphere or/and the planet's surface. For this purpose, an ion and neutral mass spectrometer, capable of determining the mass and energy of the particles in the exosphere was defined.

A numerical model of the instrument is optimized in order to cover the requested instrumental performances. This numerical model has been then used to design, build and test the first prototype of NIMEIS.

I also worked on the development of an ionization source, necessary for the operation of the neutral mass spectrometer. This original ionization source was based on the use of carbon nanotubes as electron emitters. We work in collaboration with a South Korean laboratory that provides us carbon nanotube emitters. Our tasks were to design, build and model device of extraction in the aim to optimize the principle of the electron extraction.

I also worked on the definition and optimization of the numerical model of the instrument PICAM (Planetary Ion CAMera). PICAM is an ion mass spectrometer on the BepiColombo mission which will study Mercury's exosphere. The originality of this instrument is to measure mass and energy as well as to provide an instantaneous image of an hemisphere. The goals of the numerical optimization was to start from the design of the instrument DION for the Phobos-Grunt Mission (Vaisberg et al. 2010) and to increase as much as possible the geometrical factor in order to achieve the required performances in Mercury's exosphere.

Table des matières

I.	INTRODUCTION	1
II.	ENVIRONNEMENTS PLANETAIRES NEUTRES ET IONISES.....	3
1.	EXOSPHERE PLANETAIRE : COMPOSANTE THERMIQUE.....	4
1.1.	<i>Modèle barométrique et nombre de Knudsen.....</i>	<i>4</i>
1.2.	<i>Modèle de Chamberlain.....</i>	<i>6</i>
1.3.	<i>Echappement thermique d'une exosphère</i>	<i>7</i>
2.	EXOSPHERE PLANETAIRE : COMPOSANTE SUPRA-THERMIQUE	8
2.1.	<i>Mars</i>	<i>8</i>
2.2.	<i>Mercure.....</i>	<i>12</i>
2.3.	<i>Ganymède.....</i>	<i>15</i>
III.	SPECTROMETRIE DE MASSE POUR L'EXPLORATION DES ENVIRONNEMENTS	
	PLANETAIRES	21
1.	OBJECTIFS INSTRUMENTAUX	21
2.	DE LA FONCTION DE DISTRIBUTION AUX MESURES INSTRUMENTALES	24
3.	LA SPECTROMETRIE DE MASSE, TECHNIQUES EXISTANTES	27
3.1.	<i>L'analyseur magnétique.....</i>	<i>27</i>
3.2.	<i>Le quadropôle</i>	<i>28</i>
3.3.	<i>La trappe ionique</i>	<i>30</i>
3.4.	<i>L'orbitrap.....</i>	<i>31</i>
3.5.	<i>L'analyseur temps de vol.....</i>	<i>32</i>
3.6.	<i>L'analyseur en énergie électrostatique</i>	<i>34</i>
4.	QUELQUES EXEMPLES DE SPECTROMETRES DE MASSE DANS LE SPATIAL.....	35
4.1.	<i>Spectromètres de masse d'ions à large champ de vue.....</i>	<i>35</i>
4.1.1.	<i>MSA.....</i>	<i>36</i>
4.1.2.	<i>DYMIO.....</i>	<i>37</i>
4.1.3.	<i>PICAM.....</i>	<i>38</i>
4.2.	<i>Spectromètres de masse neutre :</i>	<i>39</i>
4.2.1.	<i>STROFIO</i>	<i>39</i>
4.2.2.	<i>ELENA.....</i>	<i>40</i>
4.2.3.	<i>ROSINA.....</i>	<i>41</i>
4.2.4.	<i>NGMS</i>	<i>42</i>
4.3.	<i>Leçon récente de la sonde ROSETTA</i>	<i>43</i>

IV. ANALYSE DES NEUTRES THERMIQUES ET SUPRATHERMIQUES : LE SPECTROMETRE

NIMEIS	47
1. OBJECTIFS INSTRUMENTAUX.....	47
1.1. Source d'ionisation à très haut rendement.....	47
1.2. Principe de mesure instantanée de l'énergie et de la masse.....	48
2. OPTIQUE DU SPECTROMETRE : ETUDE ET MODELISATION	49
2.1. Outils : logiciel d'optique électrostatique et algorithme génétique.	49
2.1.1. Logiciel d'optique électrostatique : SIMION®	49
2.1.2. Algorithme génétique	50
2.2. Modèle originel	51
2.2.1. Analyseur en énergie.	52
2.2.2. Optique de temps de vol.	56
2.3. Evolution de NIMEIS.....	58
2.3.1. Réflectron.....	58
2.3.1.1. Analyse théorique du réflectron.....	58
2.3.1.2. Adaptation du modèle théorique à un modèle réaliste	68
2.3.1.3. Optimisation du réflectron	69
2.3.2. Du réflectron à la source d'ionisation.....	76
2.3.3. Du déflecteur à la masse des particules	80
2.3.4. Modèle final du prototype et performances.....	82
2.4. Applications et Perspectives.....	91
2.4.1. Appel d'offre de la mission JUICE	91
2.4.1.1. Mission JUICE	91
2.4.1.2. Couplage de l'optique de NIMEIS avec la source de STROFIO	91
2.4.2. Modélisations futures et améliorations du prototype de NIMEIS	93
2.5. Simulation de la mesure :.....	94
2.5.1. Simulation dans l'exosphère de Mars.....	95
2.5.2. Simulation dans l'exosphère de Ganymède	96
2.6. Résumé.....	99
3. REALISATION DU PROTOTYPE DE LABORATOIRE ET MESURES INITIALES.....	100
3.1. Modèle mécanique de l'optique obtenu à partir du modèle numérique.....	101
3.1.1. Optique d'accélération.	101
3.1.2. Lentille XY.....	102
3.1.3. Lentille YZ et déflecteur	102
3.1.4. Réflectron.....	103
3.2. Source d'ionisation : héritage PALOMA	104
3.2.1. L'instrument PALOMA.....	104
3.2.2. Source d'ionisation.....	105
3.3. Détecteur.....	107
3.3.1. Micro Channel Plate (MCP).....	108
3.3.2. Mesure du positionnement	109
3.3.2.1. Collecteur triangles	109
3.3.2.2. Système triangle et amplificateurs	110

3.3.2.3.	Mesure de signaux à partir d'une injection générée par une pastille.....	110
3.3.2.4.	Mesure des signaux en sortie des MCP	115
3.4.	<i>Tests du prototype NIMEIS</i>	116
3.4.1.	Détecteur double collecteur	116
3.4.2.	Détecteur final	117
3.4.2.1.	Mesure de bruit	117
3.4.2.2.	Modifications du prototype.....	119
3.4.2.3.	Variation du rapport V_p/G_2	121
3.4.2.4.	Mesure en temps de vol	125
3.5.	<i>Résumé</i>	128
4.	SOURCE D'IONISATION.....	129
4.1.	<i>Approche</i>	129
4.1.1.	Emetteurs d'électrons.....	129
4.1.2.	Contraintes.....	130
4.2.	<i>Emetteurs CNT</i>	131
4.2.1.	Emission par effet de champ	131
4.2.2.	Etat de l'art.....	132
4.2.3.	Objectifs instrumentaux	133
4.3.	<i>Optimisation de la méthode d'extraction</i>	134
4.3.1.	Premier montage d'extraction.....	135
4.3.2.	Mesures	136
4.3.3.	Interprétation et simulations.....	138
4.4.	<i>Deuxième version du montage d'extraction</i>	154
4.4.1.	Description	154
4.4.2.	Mesures	155
4.4.3.	Vers un modèle final	156
4.5.	<i>Résumé</i>	156

V. ANALYSE DES IONS DE BASSE ENERGIE SUR LE SATELLITE MPO DE BEPI COLOMBO : LE

SPECTROMETRE PICAM	161
1. INTRODUCTION	163
2. 3D CHARGED PARTICLE MEASUREMENTS ON-BOARD 3 AXIS STABILIZED SPACECRAFT	164
3. OVERVIEW OF THE ION OPTICS AND BASIC PICAM OPERATION	165
3.1. <i>Description of the ion optics.</i>	166
3.2. <i>In-flight PICAM operation.</i>	170
4. NUMERICAL MODELLING OF THE ION OPTICS	171
4.1. <i>Optimization of the ion optics, principles</i>	174
4.2. <i>Mirror M1, blades and gating electrodes</i>	175
4.2.1. Mirror M1.....	175
4.2.2. Blades.....	185
4.2.3. Gating electrodes.....	188
4.3. <i>The imager part of PICAM</i>	190
4.3.1. Electrostatic Analyzer	190
4.3.2. Electrostatic Converging lens (ECL).....	191
4.3.3. M2 mirror.....	192
4.3.4. The [ECL + ESA + M2]=EEM subsystem.....	193

4.4.	<i>TOF Simulation</i>	<i>197</i>
4.5.	<i>PICAM modelling with the new version of SIMION® software</i>	<i>198</i>
4.6.	<i>Overall Performances of PICAM.....</i>	<i>200</i>
5.	TESTING AND INITIAL RESULTS	205
VI.	CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES	205
	BIBLIOGRAPHIE	209

I. Introduction

Pendant longtemps, les hommes ont étudié les étoiles et les planètes en observant le ciel sans instruments. Ils ont peu à peu développé des lunettes astronomiques et des télescopes, ce qui a permis de nombreuses découvertes, notamment l'organisation du système solaire. Une nouvelle ère de l'observation astronomique est apparue avec l'utilisation d'instruments capables de mesurer des phénomènes invisibles à l'oeil (télescopes infra-rouge). La dernière grande révolution en astrophysique a été permise par l'exploration spatiale, illustrée par la multiplication des missions interplanétaires qui nous ont permis d'observer in situ la plupart des objets du système solaire. Cette dernière et relativement récente étape a motivé le développement d'une multitude d'instruments et ouvert l'accès à des progrès technologiques pour faire face aux contraintes de l'exploration spatiale et développer un effort permanent d'amélioration des performances de l'instrumentation à la base de cette exploration. Cette recherche permanente d'amélioration est surtout motivée par les contraintes de plus en plus strictes en termes de taille, de poids et de consommation de l'instrument en plus de devoir fournir des équipements de plus en plus sensibles, performants en termes de résolution et domaines spectraux.

Parmi ces instruments, une catégorie est particulièrement adaptée à la mesure in situ des plasmas spatiaux et enveloppes de gaz ionisés des objets planétaires du système solaire. La spectrométrie de masse permet en effet d'identifier la masse des constituants d'un milieu sur une large gamme de masse et de résolution. Cette instrumentation est de plus en plus embarquée sur les missions d'exploration planétaires, notamment lorsqu'il s'agit d'observer les atmosphères planétaires et leur interaction avec le milieu interplanétaire. Cependant, jusqu'à présent, essentiellement la composante ionisée produite par cette interaction a été observée in situ au dessus de l'exobase (à l'exception de Titan où de nombreuses mesures de la composante neutre ont été possibles grâce à la mission CASSINI) ; la composante neutre n'ayant jamais été observée de manière systématique autour de Mars par exemple. La raison principale de ce manque d'observation est la difficulté jusqu'à aujourd'hui d'analyser des milieux que l'on qualifierait sur Terre de vides, uniquement peuplés de quelques particules par cm^3 . Pourtant, ces régions sont riches en information sur la manière dont les objets planétaires réagissent à leur environnement, la composante neutre de ces régions étant probablement la plus simple à interpréter de ce point de vue.

L'objet de cette thèse est de contribuer au développement d'une nouvelle génération d'instruments qui pourrait faire avancer notre compréhension de cette interaction. Nous allons illustrer son intérêt en détaillant trois objets planétaires de notre système solaire ; Mars, Mercure et Ganymède. En partie motivés par l'actualité du programme spatial Européen, ces trois objets recouvrent à eux trois près de l'ensemble des conditions d'interaction entre le milieu interplanétaire et les corps planétaires de notre système solaire. Dans le cas de Mars et de Mercure, le vent solaire est le principal élément qui sculpte l'environnement de ces deux objets. Dans le cas de Mars, l'obstacle est son atmosphère/ionosphère, dans le cas de Mercure, sa magnétosphère intrinsèque. Dans le cas de Ganymède, c'est la magnétosphère de Jupiter qui

constitue l'environnement de cet objet, dont la surface est à la fois protégée par une atmosphère très peu dense et par une magnétosphère intrinsèque.

Deux instruments ont donc été étudiés au cours de cette thèse.

Le premier est un nouveau spectromètre de masse neutre et ion, NIMEIS (pour Neutral and Ion Mass and Energy Imaging Spectrometer). Pour NIMEIS, le travail que j'ai effectué a débuté par la définition d'un modèle numérique complet de l'instrument (section 2 du chapitre IV), à partir du concept imaginé par F. Cipriani durant sa thèse (Cipriani 2006), contraint par un ensemble d'objectifs instrumentaux définis dans le cadre de projets de missions d'exploration autour de Mars et Ganymède (section 1 du chapitre III). J'ai ensuite participé à la conception du premier prototype de NIMEIS (section 3.1 du chapitre IV). Enfin, j'ai réalisé depuis plusieurs mois la mise au point et les premiers tests de ce prototype (section 3.4 du chapitre IV). Parce qu'une source d'ionisation est par ailleurs nécessaire à l'analyse par spectrométrie de masse d'un environnement neutre, mon travail a également consisté à concevoir un modèle de source d'ionisation par impact électronique basée sur l'utilisation de nanotubes de carbone comme émetteurs d'électrons. En travaillant en collaboration avec un laboratoire sud-Coréen, un dispositif d'extraction d'électrons à partir de nanotubes de carbone a été défini, réalisé et testé (section 4 du chapitre IV).

Le deuxième instrument est un spectromètre de masse d'ions à champ de vue hémisphérique, PICAM, pour Planetary Ion CAMera, développé dans le cadre de la mission Bepi-Colombo. Cet instrument couvre un tout autre domaine d'énergie et d'objectifs scientifiques que NIMEIS, notamment en terme de couverture en énergie et de résolution angulaire. Pour PICAM, j'ai réalisé le modèle numérique complet de l'optique électrostatique, ce qui a permis d'améliorer significativement le premier concept de cet instrument, de déterminer ses performances et d'interpréter les tests sur le prototype (section 4 du chapitre V).

L'ensemble de mon travail de thèse m'a permis de préparer deux articles qui sont en cours de soumission : le premier faisant l'objet de l'étude de l'extraction des électrons en sortie des nanotubes de carbone par simulation, le deuxième porte sur le développement de l'optique de l'instrument PICAM. J'ai également participé à une réponse à l'appel d'offre de la mission JUICE.

Ce manuscrit s'articule de la façon suivante : la première partie revient sur les objectifs scientifiques. La deuxième partie dévoile les objectifs instrumentaux, les techniques de mesures possibles ainsi qu'un ensemble d'exemples d'instruments de spatiaux. La troisième partie traite du développement de l'instrument NIMEIS. La quatrième partie détaille le développement du modèle numérique de PICAM, pour finir ensuite par la conclusion et les perspectives.

II. Environnements planétaires neutres et ionisés

Cette thèse est focalisée sur trois applications possibles : l'exploration de Mars, Mercure et Ganymède. L'intérêt d'étudier ces 3 corps réside dans le fait qu'ils représentent à eux trois un large éventail de conditions environnementales rencontrées dans le système solaire.

Le premier, Mars, est un corps planétaire muni d'une atmosphère en interaction avec le vent solaire. Mars est composé d'une magnétosphère locale qui ne suffit pas à faire obstacle au vent solaire. Il a été montré (Acunà et al. 1999) qu'à l'origine, Mars disposait d'une dynamo interne générant un champ magnétique planétaire. Celui-ci protégeait la planète d'une interaction directe avec le vent solaire comme le cas de la Terre aujourd'hui. Pendant cette période, l'eau à l'état liquide était présente à la surface de Mars (Carr 1999). L'arrêt de cette dynamo est intimement lié à l'hypothèse de la disparition rapide de l'eau à la surface de Mars. A savoir si cette eau s'est échappée dans le milieu interplanétaire ou a été peu à peu piégée dans la croûte (Chassefière and Leblanc 2011) sont encore deux hypothèses très débattues. Caractériser l'échappement se produisant actuellement nous permettrait donc de mieux comprendre si l'échappement atmosphérique peut expliquer cette évolution dramatique de Mars (Luhmann et al. 1992). La mission MAVEN sera lancée en novembre 2013 pour répondre à cette question mais, soulignons le, n'emporte pas à son bord une instrumentation capable de mesurer directement l'échappement atmosphérique neutre.

Dans le cas de Mercure, où il n'y a pas d'atmosphère, l'interaction du vent solaire se fait directement avec la surface de la planète. Mercure possède cependant un champ magnétique qui la protège du vent solaire. L'origine de cette magnétosphère intrinsèque à Mercure, corps inactif tectoniquement depuis plusieurs milliards d'années, est une énigme. Du fait de sa proximité avec le soleil, Mercure est soumis à un environnement très énergétique. Les particules formant l'atmosphère ténue de la planète proviennent de l'interaction des rayons solaires avec la surface et du criblage de sa surface par le vent solaire et les météorites (Milillo et al. 2007). La surface est donc en permanence érodée. L'étude de la composition, la variabilité et la structure de l'atmosphère de Mercure permettent donc de mieux appréhender la manière dont une surface planétaire évolue dans notre système solaire. C'est pourquoi l'étude de l'atmosphère de Mercure fait l'objet de plusieurs missions spatiales. La dernière en date, MESSENGER, a été lancée en 2004 (Solomon et al. 2001). La prochaine mission, Bepi-Colombo, avec un lancement prévu en 2016, atteindra Mercure en 2023.

Le troisième cas abordé dans cette thèse est Ganymède. Ganymède est l'un des quatre satellites galiléens du système de Jupiter. Sa surface est constituée de glace d'eau. Elle a la particularité de se trouver protégée du vent solaire par la magnétosphère de Jupiter et possède également une magnétosphère propre capable de préserver sa surface des interactions du plasma jovien à certains endroits. Tout comme dans le cas de Mercure, l'étude de l'atmosphère de Ganymède est

primordiale pour comprendre l'évolution de sa surface. Cependant, contrairement à Mercure, c'est le plasma jovien qui tient le rôle principal d'agent d'érosion. De plus, la présence d'une atmosphère ténue rend cette interaction plus complexe. Une prochaine mission spatiale a pour objectif l'étude du système de Jupiter avec une mise en orbite autour de Ganymède. Cette mission, JUICE, est prévue pour 2022 avec une arrivée dans le système de Jupiter prévue en 2030.

L'étude de ces trois corps recouvre donc trois types d'interactions avec leur l'environnement externe, que ce soit le vent solaire, les rayons solaires ou le plasma jovien. La présence d'atmosphère dense modifie cette interaction ainsi que la composition de la surface si le corps planétaire est dépourvu d'atmosphère. Enfin, la présence ou non de magnétosphère modifie la zone où cette interaction à lieu.

1. Exosphère planétaire : Composante thermique

L'exosphère constitue la partie externe de l'atmosphère d'un corps planétaire. Cette partie de l'atmosphère est définie comme une zone dans laquelle les collisions des particules sont négligeables. C'est au niveau de l'exosphère que l'on va généralement trouver les signatures de l'interaction entre les corps planétaires et leur environnement externe. En caractériser les processus de formation revient donc à observer l'effet de cette interaction sur ces corps et donc à reconstruire leur évolution, érosion et maturation suite à cette interaction. Pour bien comprendre comment se peuple cette région, nous allons partir d'un modèle théorique décrivant les exosphères, ayant ses limites.

1.1. Modèle barométrique et nombre de Knudsen

Afin de représenter une atmosphère planétaire dense, la loi barométrique qui suppose une atmosphère à l'équilibre hydrostatique, isotherme, composée d'un gaz parfait se trouve être une approche simple valable dans les milieux collisionnels. Cette approche permet l'obtention d'une équation de densité en fonction de l'altitude selon l'axe Z:

$$n(z) = n(z_0) \exp\left(-\frac{\Delta z}{H}\right) \quad (II-1)$$

où $n(z)$ représente la densité à l'altitude, $\Delta z = z - z_0$ et H l'échelle de hauteur de l'atmosphère définie par :

$$H = \frac{k_B T}{mg} \quad (II-2)$$

Avec k_B la constante de Boltzmann, T la température du milieu, m la masse de la particule et g l'accélération gravitationnelle. L'échelle de hauteur correspond au changement d'altitude nécessaire pour diminuer la densité d'un facteur $\frac{1}{e}$.

Cette description est vite limitée par les hypothèses choisies. On peut la modifier en prenant en compte plusieurs espèces, qui auront chacune leur propre échelle de hauteur, et en faisant varier g :

$$g = \frac{GM}{r^2} \text{ Où } G \text{ est la constance gravitationnelle et } M \text{ la masse du corps planétaire,}$$

Ce qui implique pour chaque espèce i :

$$n_i(r) = n_i(r_0) \exp^{(\lambda(r) - \lambda_i(r_0))} \quad (II-3)$$

Où r_0 est une altitude de référence et λ le paramètre d'échappement, défini par :

$$\lambda_i(r) = \frac{GMm_i}{k_B T_r} = \frac{v_{esc}^2}{v_{th}^2} \quad (II-4)$$

λ_i correspond au rapport de la vitesse d'échappement sur la vitesse thermique car $v_{esc} = \sqrt{\frac{2GM}{r}}$
et $v_{th} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m_i}}$.

L'expression de l'échelle de hauteur est alors légèrement différente :

$$H_i = \frac{R^2 k_B T}{GMm_i} \quad (II-5)$$

où R est le rayon de la planète.

Cette formulation présente toutefois le problème majeur de décrire un milieu avec une densité non nulle lorsque $r \rightarrow \infty$.

Cette formule n'est pas valable "loin" de la planète, à des distances où les collisions deviennent négligeables à une certaine altitude car la densité diminue en fonction de celle-ci. L'hypothèse d'une atmosphère hydrostatique n'est alors plus valable. Les collisions (via la pression) ne contrôlent plus l'organisation en altitude de la densité.

On introduit donc la notion d'exosphère qui définit ce milieu dans lequel les collisions entre particules deviennent négligeables. Pour différencier un milieu collisionnel d'un milieu non collisionnel, on introduit le nombre de Knudsen K_n , qui est le rapport du libre parcours moyen des particules sur l'échelle de hauteur :

$$K_n = \frac{l(r)}{H} \quad (II-6)$$

- $K_n \ll 1$, le milieu est dit collisionnel
- $K_n \sim 1$, le milieu est quasi-collisionnel
- $K_n \gg 1$, le milieu est non collisionnel

Le libre parcours moyen correspond à la distance moyenne parcourue par une particule entre deux collisions. Lorsque $K_n = 1$, l'altitude correspondante est appelée exobase. Sur Terre, l'exobase se situe à ~500km, sur Mars ~200km, sur Mercure l'exobase se trouve à la surface et pour Ganymède, celle-ci se trouve proche de la surface.

A titre d'exemple, la *Figure II-1* montre le nombre de collisions qu'une particule de H_2O ferait en moyenne en se déplaçant radialement à partir d'une position située dans le plan midi/minuit passant par les pôles sur Ganymède.

La région subsolaire est constituée d'une petite atmosphère dans laquelle le nombre de collisions est supérieur à 10. Celui-ci est $\ll 1$ sur le reste de la surface de Ganymède.

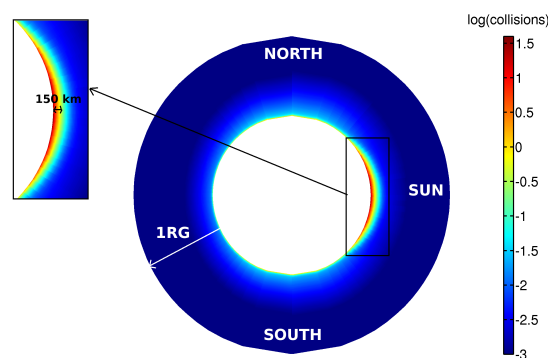


Figure II-1 : Nombre de collisions d'une particule de H_2O se déplaçant radialement dans l'exosphère de Ganymède à partir d'une position du plan midi/minuit passant par les pôles.
Turc et al. 2013

Le peuplement de l'exosphère se fait via le milieu présent sous l'exobase avec des particules dont une partie possède l'énergie de la température du milieu, représentant la composante thermique de l'exosphère (section 1.2 du chapitre II) et une partie constituée de particules dites suprathermiques qui sont décrites dans les sections suivantes pour chacun des 3 objets abordés dans ce chapitre.

1.2.Modèle de Chamberlain

Pour comprendre le fonctionnement de la composante thermique de l'exosphère, J.W. Chamberlain a établi en 1963 un modèle simple basé sur la résolution de l'équation de Liouville (Chamberlain 1963). Ce modèle décrit 5 populations de l'exosphère présentes au dessus de l'exobase :

- les particules échappées qui coupent l'exobase et s'échappent du champ gravitationnel,
- les particules balistiques qui traversent l'exobase et ont des trajectoires balistiques avec des énergies inférieures à l'énergie d'échappement,
- les particules satellites piégées gravitationnellement mais qui ne coupent pas l'exobase,
- les particules capturées provenant de l'infini et pouvant ou non impacter l'atmosphère.
- les particules dites fly-by provenant de l'infini et s'approchant de l'exobase mais qui ne sont pas piégées gravitationnellement.

En supposant une distribution maxwellienne à l'exobase et une exosphère en équilibre avec l'atmosphère en dessous, il est possible de déterminer pour chacune des populations le profil de densité en fonction de la distance à la planète.

La Figure II-2 montre un exemple de profils de densité. La densité de l'exosphère tend vers une valeur non nulle lorsque la distance devient infinie dans le cas d'une formule barométrique. Dans le cas du modèle de Chamberlain, la densité tend effectivement vers zéro.

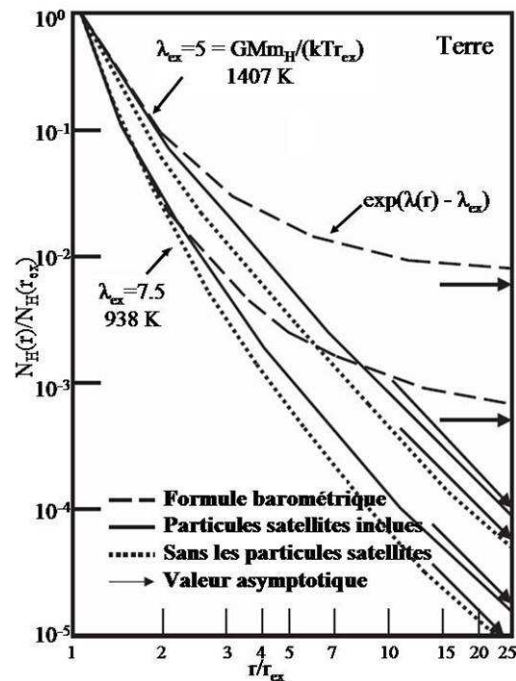


Figure II-2 : Profils de densité déterminés à partir de la formule barométrique et du modèle de Chamberlain sur Terre. Plusieurs valeurs du paramètre d'échappement λ_{ex} , représentatifs de l'hydrogène terrestre sont représentées (adapté de Chamberlain 1963).

Sur la Figure II-2 est également représentée la contribution à la densité due aux particules satellites qui sont souvent évoquées dans les modèles décrivant l'exosphère. Ces particules, pour qu'elles existent et qu'elles proviennent du corps planétaire, doivent subir des collisions au dessus de l'exobase. Elles sortent donc formellement du concept d'exobase. Tout comme d'ailleurs les particules capturées et fly-by qui toutes deux proviennent de l'infini. Le modèle de Chamberlain est donc particulièrement adapté à la description des particules balistiques et s'échappant.

1.3. Echappement thermique d'une exosphère

Lorsqu'une particule a une vitesse supérieure à la vitesse d'échappement, elle est susceptible de s'échapper vers le milieu interplanétaire. En utilisant le modèle de Chamberlain, il est possible de déterminer le flux s'échappant de l'atmosphère essentiellement fonction de la densité et de la température à l'exobase ; il s'agit de l'échappement de Jeans (Jeans 1916). Les particules les plus

énergétiques s'échappent vers le milieu interplanétaire, la queue de la distribution des vitesses à l'exobase se vide alors lentement des particules énergétiques et se repeuple via les collisions.

Il peut arriver aussi, dans un comportement asymptotique de l'échappement de Jeans, que le flux de gaz léger soit si important qu'il provoque un échappement de particules plus lourdes ; cet effet porte le nom d'échappement hydrodynamique. Un tel échappement nécessite toutefois une forte activité solaire (ex. conditions solaires primitives).

Aujourd'hui, seules les particules les plus légères (H et He) de l'atmosphère martienne s'échappent de la planète de manière significative par échappement de Jeans (Chaufray et al. 2009).

2. Exosphère planétaire : composante supra-thermique

L'origine de la composante suprathermique est propre à chacun des corps planétaires, notamment suivant la présence ou non d'une atmosphère (c'est le cas de Mars), d'une magnétosphère intrinsèque (Mercure et Ganymède) et du type d'environnement dans lequel se trouve le corps planétaire (vent solaire ou magnétosphère). Nous allons donc décrire cette composante pour chacun des trois corps planétaires introduits précédemment.

2.1. Mars

L'atmosphère de Mars est très ténue, en comparaison avec celle de la Terre. La température de la thermosphère est de l'ordre de 200K au minimum d'activité solaire. La population thermique a alors une énergie de $\sim 0.017\text{eV}$ pour un atome d'oxygène.

L'exosphère a été observée depuis la Terre par la mesure de l'émission Lyman- α ainsi que lors de missions autour de Mars. La mesure de la composante neutre en hydrogène par spectrométrie UV au delà de quelques rayons martiens (Barth et al. 1971; Chaufray et al. 2009) a été réalisée. La composante neutre en oxygène a également été observée jusqu'à 700km d'altitude (Barth et al. 1971; Chaufray et al. 2008). La composante chaude de l'oxygène exosphérique martien a été mise en évidence lors du survol de la sonde Rosetta par le spectromètre UV ALICE (Feldman et al. 2011).

Les caractéristiques de l'atmosphère de Mars dépendent beaucoup de l'activité solaire.

L'atmosphère est essentiellement composée de CO_2 (95,3%), mais aussi de diazote (2,7%) et d'argon (1,6%). La pression moyenne est de 6mbar au sol (Owen 1966) et (Kliore et al 1965, Barth 1974). Les éléments CO_2 , N_2 , CO , O_2 et NO ont été observés par spectrométrie de masse et les profils thermosphériques ont pu être établis, ils sont détaillés sur la *Figure II-3*.

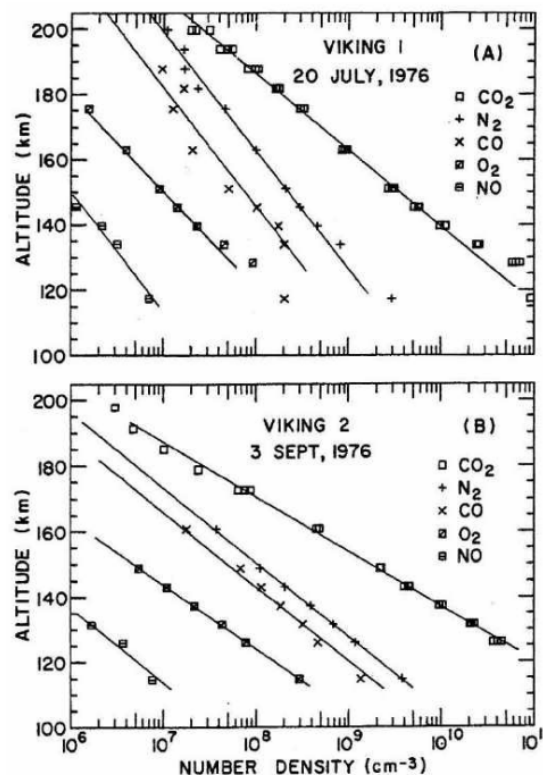


Figure II-3 : Profils de densité des composés neutres de la haute atmosphère de Mars mesurés par les sondes Viking. (Nier and McElroy 1977)

L'exobase de Mars se trouve à une altitude moyenne de 200km par rapport à la surface. L'exosphère se peuple de particules thermiques suivant le modèle de Chamberlain (voir section 1.2 du chapitre II). On va aussi y observer une seconde catégorie de particules : les particules suprathermiques. Cette population suprathermique exosphérique martienne se forme à partir de deux principaux processus, le criblage de l'atmosphère et la recombinaison dissociative. Cette population suprathermique est particulièrement intéressante car elle est directement associée à l'érosion de l'atmosphère martienne.

Le criblage consiste à former des particules neutres peuplant l'exosphère à partir de collisions d'ions dans l'atmosphère. Les particules exosphériques peuvent être ionisées par interaction avec les particules du vent solaire et par le flux solaire. Ces ions vont être piégés puis accélérés et sont susceptibles de réimpacter l'atmosphère au niveau de l'exobase. Le mouvement des ions dans la magnétosphère martienne dépend essentiellement de la direction du champ électrique de convection $E = -v_w \times B_w$ (où v_w correspond au vecteur vitesse du vent solaire), ainsi que du champ magnétique B_w du vent solaire, et se traduit par des trajectoires cycloïdales. Le criblage est un processus collisionnel. De ce fait, Johnson (1990) a proposé deux cas de figures possibles. La particule va impacter l'atmosphère, réaliser une collision et le produit de collision peut repartir dans l'exosphère (cas 1 de la Figure II-4), ou encore la collision engendre une cascade de collisions dont un certain nombre sont susceptibles de générer des particules secondaires qui peuvent s'échapper (cas 2 de la Figure II-4).

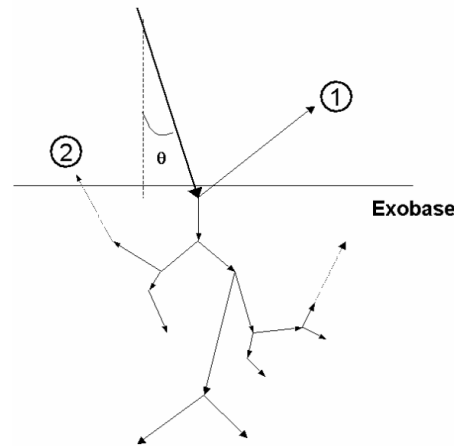


Figure II-4 : Schéma de représentation de l'impact d'une particule dans l'atmosphère. Une cascade de collisions donne lieu à la formation de particules suprathermiques (thèse de F. Cipriani 2006).

Le rendement du criblage en terme d'échappement est défini comme le rapport du nombre de particules éjectées sur le nombre de particules incidentes :

$$Y = \frac{N_{\text{éjectées}}}{N_{\text{incidentes}}}$$

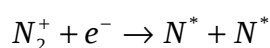
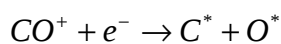
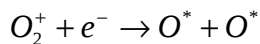
Le rendement du criblage va dépendre de l'angle θ d'incidence, de l'énergie et la masse de la particule incidente, de la composition de l'atmosphère impactée et de la structure verticale. En général, dans le cas 2 de la Figure II-4, le rendement est un à deux ordres de grandeurs supérieur à celui du cas 1. Dans le cas martien, le maximum en énergie se situe pour l' O^+ autour du keV (Johnson et al. 2002). Dans le cas 1, l'énergie de la particule envoyée dans l'exosphère peut acquérir une proportion importante de l'énergie de la particule incidente. Dans le cas 2, la cascade de collisions fait perdre de l'énergie aux produits de collisions, qui donne un maximum d'énergie autour de l'eV des particules éjectées vers l'exosphère.

Les produits de collision sont les composants de l'atmosphère, à savoir l'oxygène, le dioxyde de carbone ainsi que leurs produits de dissociation mais aussi du dioxyde d'azote et de l'argon (Jakosky et al. 1994).

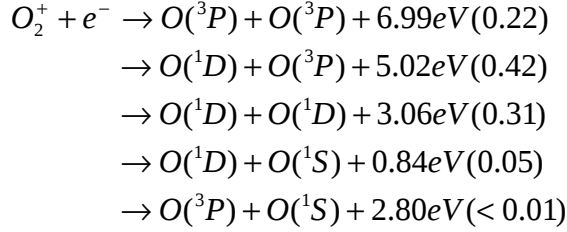
La recombinaison dissociative (RD) est la réaction photochimique dans la thermosphère/ionosphère à l'origine de la plus grande quantité de particules suprathermiques exosphériques. La recombinaison entre un ion moléculaire AB^+ présent dans l'atmosphère et un électron entraîne la formation d'un neutre métastable AB^{**} , qui va se séparer rapidement pour former deux espèces neutres A^* et B^* .



Les modèles actuels prédisent des composantes chaudes pour plusieurs éléments atomiques (C, N, O, H). Ces populations chaudes viennent essentiellement de processus photochimiques, dont la recombinaison dissociative des ions ionosphériques majoritaires est :



La recombinaison dissociative de O_2^+ , l'ion majoritaire dans l'ionosphère martienne (*Figure II-3*) se décompose en 5 canaux énergétiques :



Les canaux énergétiques (indiqués entre parenthèse) ont été mesurés par Kella et al. (1997) dans un anneau de stockage (accélérateur de particules) selon la méthode des faisceaux croisés. Le nombre de recombinaison dissociative par unité de temps et de volume est donné par Peverall et al. (2001) :

$$k = 2.4 \times 10^{-7} \left(\frac{300}{T_e} \right)^{0.7} n_e n_{O_2^+} \cdot cm^3 \cdot s^{-1}$$

où T_e est la température électronique, n_e est la densité électronique et $n_{O_2^+}$ est la densité en O_2^+ .

La *Figure II-5* montre la distribution en énergie des particules d'oxygène formées à partir de la recombinaison dissociative sur laquelle l'on peut voir 4 pics correspondant aux différentes transitions énergétiques. Le cinquième canal n'est pas visible car sa probabilité de transition est inférieure à 1% et se trouve confondue avec le troisième canal dont la probabilité est de 31%.

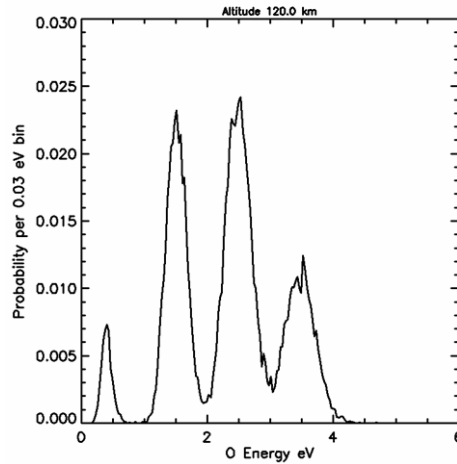
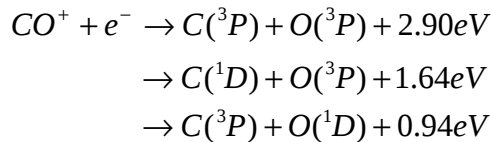
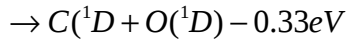
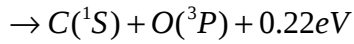


Figure II-5 : Distribution en énergie des particules O produites par recombinaison dissociative (Fox and Hac 2009)

De même que pour la molécule d' O_2^+ , la molécule de CO^+ est aussi importante pour comprendre la densité de carbone dans l'exosphère ainsi que son échappement. La recombinaison dissociative de CO^+ s'effectue suivant les canaux énergétiques suivants :





Avec des taux de production généralement admis et mesurés par Rosen et al. (1998) :

$$k = 2.75 \times 10^{-7} \left(\frac{300}{T_e} \right)^{0.55} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$$

La recombinaison dissociative va se produire dans l'ionosphère avec un taux de production dépendant de l'altitude. Le taux de production va être maximal au pic de densité électronique.

La *Figure.II-6* suivante montre la distribution en énergie pour les particules exosphériques produites par les deux processus décrits précédemment. Les lignes pointillées verticales donnent les énergies d'échappement pour chaque élément. La distribution en énergie de la recombinaison dissociative ne va pas au-delà de 5eV alors que le criblage se prolonge au-delà de 15eV. La mesure en énergie de particules au-delà de 5eV devrait donc permettre de faire la distinction entre les deux processus.

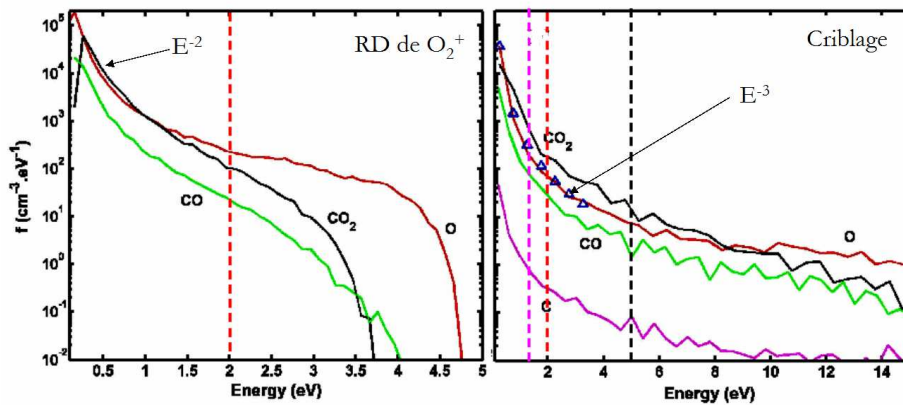


Figure.II-6 : Distribution en énergie de différentes molécules issues de la recombinaison dissociative (graphique de gauche) et du criblage (graphique de droite) moyennées sur une altitude entre 185km et 215km, au maximum d'activité solaire. Les traits en pointillés correspondent aux limites d'énergie d'échappement pour chaque élément (Thèse F. Cipriani 2006).

2.2.Mercure

Contrairement à Mars, Mercure ne possède pas d'atmosphère. Son environnement est donc essentiellement composée d'une exosphère dont la pression est inférieure à 1×10^{-11} mbar.

La première détection de l'exosphère a été effectuée lors des trois survols de MARINER 10 autour de Mercure. L'instrumentation de MARINER 10 comprenait deux instruments dédiés aux observations des spectres d'absorption et d'émission de l'environnement gazeux de Mercure, pour une gamme de longueurs d'onde autorisant la détection de He^+ , He, Ne, Ar, Xe, H, O et C (Broadfoot, 1976 ; 1977a ; 1977b). Un contraste de distribution a été mis en évidence entre le côté jour et nuit pour les éléments H et He. Les observations depuis la Terre ont mis en évidence une exosphère composée également de Na, K et Ca, (Potter and Morgan, 1985 ; 1986 ; Bida et al., 2000). En 2004, la sonde NASA MESSENGER a été lancée vers Mercure pour une mise en orbite

en 2008. La sonde MESSENGER est munie d'un spectromètre UV pour mesurer l'émission résonnante des composées de l'exosphère de Mercure (McClintock et al. 2008).

La prochaine mission prévue pour l'étude de Mercure se nomme Bepi-Colombo. Avec un lancement prévu pour 2016, ce satellite devrait arriver en orbite autour de Mercure en 2023. Bepi-Colombo est composé de deux orbiteurs, MPO (Mercury Planetary Orbiter) et MMO (Mercury Magnetospheric Orbiter). Les objectifs principaux de cette mission sont de caractériser l'exosphère, la surface et la magnétosphère de Mercure. Avec deux points de mesure (MMO et MPO) et une instrumentation beaucoup plus importante que MESSENGER, Bepi-Colombo devrait permettre de bien mieux caractériser les origines, l'évolution et les relations entre exosphère, magnétosphère et surface.

Lorsqu'il n'y a pas d'atmosphère, l'exosphère est alors en contact direct avec la surface du corps planétaire qui est définie comme l'exobase (Stern 1999). La surface joue alors le rôle de réservoir de l'exosphère.

Plusieurs processus sont à l'origine du peuplement de l'exosphère (Figure II-7).

- La désorption thermique correspond à la situation d'une surface sur laquelle l'agitation thermique devient forte, ce qui permet aux particules des premiers μm de surface ayant une énergie suffisante de s'éjecter de la surface.
- La désorption par stimulation photonique (Photon Stimulated Desorption, PSD) correspond à l'éjection d'un atome de la surface par l'excitation électronique localement de la surface induisant des répulsions coulombiennes et l'éjection sous forme neutre des volatiles (Yakshinskiy et al. 1999).
- Un impact de météorite vaporise une partie de la météorite et de la surface au niveau de l'impact et libère des volatiles piégés (Morgan et al., 1988 ; Hunten et al., 1988) ainsi que des éléments peu volatiles ou réfractaires (Wurz and Lammer, 2003). Ces particules disposent d'une énergie suffisante pour peupler l'exosphère et sont même capable de s'échapper de l'attraction gravitationnelle.
- Comme dans le cas avec atmosphère, le criblage est présent. Les ions du vent solaire ainsi que les ions magnétosphériques interagissent avec l'environnement du corps planétaire, mis à part que dans ce cas-ci, l'interaction se fait directement avec la surface de la planète donnant lieu à des éjections suivant le même schéma que la Figure II-4.

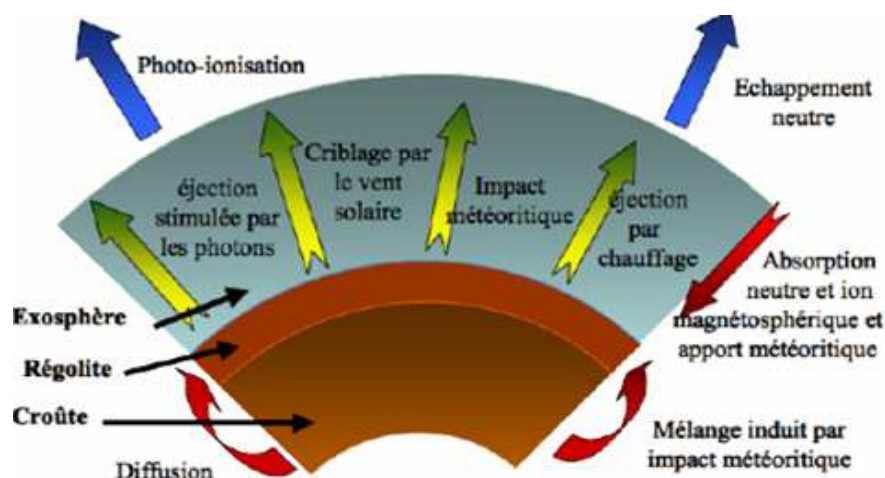


Figure II-7 : Schéma des différents processus de formation de l'exosphère dans le cas où l'exobase se situe à la surface du corps planétaire (Leblanc et al. 2007).

La densité des différents éléments exosphériques dépend de la région où a lieu les processus de formation des particules. Au niveau du point-subsolaire, le processus de photo-ionisation est dominant . Dans les régions où le vent solaire va atteindre la surface, le criblage est dominant. Le *Tableau 1* montre les densités typiques observées ou modélisées dans l'exosphère de Mercure.

Species	Zenith column density (cm ⁻²) ^a	Scale height (km) ^b	Density (cm ⁻³)	Origin of the column density
H I	3×10^9	1160 (1330)	23,230	Measured (Mariner 10)
He I	2×10^9	500 (330)	6×10^3	Measured (Mariner 10)
He II	3.5×10^6	500	0.8×10^0	Model (Leblanc et al., 2004)
Li I	$< 8.4 \times 10^7$	190	5×10^0	Upper limit (Sprague et al., 1996b)
Li II	7.8×10^5	190	2×10^0	Model (Leblanc et al., 2004)
C I	$< 1.8 \times 10^{12}$	96	1×10^4	Upper limit (Mariner 10)
C II	3.4×10^7	96	5×10^1	Model (Leblanc et al., 2004)
N I	$< 9 \times 10^{14}$	83	6×10^3	Upper limit (Mariner 10)
N II	9.6×10^9	83	1×10^0	Model (Leblanc et al., 2004)
O I	$< 3 \times 10^{11}$	72 (83)	4.4×10^4	Upper limit (Mariner 10)
O II	3.4×10^6	72	8×10^0	Model (Leblanc et al., 2004)
Ne I	3.7×10^{10}	580	6×10^3	Killen and Ip (1999)
Na I	2×10^{11}	50	$1.7-3.8 \times 10^3$	Measured (ground based)
Na II	2×10^9	50	6×10^2	Model (Leblanc et al., 2004)
Mg I	3.9×10^{10}	290	7.5×10^3	Model (Morgan and Killen, 1997)
Mg II	3.8×10^6	290	3×10^0	Model (Leblanc et al., 2004)
Al I	3×10^9	257	654	Model (Morgan and Killen, 1997)
Si I	1.2×10^{10}	248	2.7×10^3	Model (Morgan and Killen, 1997)
S I	2×10^{10}	36	5×10^3	Model (Morgan and Killen, 1997)
S II	7.9×10^9	36	6×10^5	Sprague et al. (1995; 1996a)
Ar I	1.3×10^9	29	4×10^1	Model (Leblanc et al., 2004)
K I	1×10^9	30	4×10^2	Model (Killen, 2002)
Ca I	1.1×10^8	174	3.3×10^{-2}	Measured (ground based)
Fe I	7.5×10^8	124	1.6×10^0	Measured (ground based)
Fe II	3.5×10^5	124	3.6×10^1	Model (Morgan and Killen, 1997)
H ₂	$< 2.9 \times 10^{15}$	580	0.3×10^0	Model (Leblanc et al., 2004)
OH	10^{10}	68	$< 1.4 \times 10^7$	Upper limit (Mariner 10)
H ₂ O	$< 8 \times 10^{14}$	65	1.4×10^3	Model (Morgan and Killen, 1997)
			$< 1.5 \times 10^7$	Upper limit (Mariner 10)

Tableau 1 : Densité des différents éléments présents dans l'exosphère de Mercure (Leblanc et al. 2007).

Les densités typiques dans l'exosphère de Mercure sont inférieures à 10^6 particules.cm⁻³. Les caractéristiques des ions pour Mercure sont importantes pour la définition des objectifs instrumentaux de l'instrument PICAM (chapitre V), un spectromètre de masse d'ions. Les rapports d'abondance d'ions présents dans l'exosphère de Mercure sont donnés dans le *Tableau 2*. Des densités typiques de Na⁺ typiquement de l'ordre de 100 Na⁺/cm³ à la surface ont été calculées à partir des densités neutres observées (Leblanc et al. 2003).

Mass/charge (amu/e)	Representative ion or molecular ion species	Abundance ratio*
23–24	Na ⁺ , Mg ⁺	1.00
32–35	S ⁺ , O ₂ ⁺ , H ₂ S ⁺	0.67 ± 0.06
28	Si ⁺ , Fe ⁺⁺	0.53 ± 0.06
39–40	K ⁺ , Ca ⁺	0.44 ± 0.05
17–19	H ₂ O ⁺ , H ₃ O ⁺ , OH ⁺	0.20 ± 0.03
4.67–11	Multiply charged ions	0.20 ± 0.03
16	O ⁺	0.20 ± 0.03
14	N ⁺ , Si ⁺⁺	0.09 ± 0.02
11–12	C ⁺ , Na ⁺⁺ , Mg ⁺⁺	0.08 ± 0.02
4	He ⁺	0.03 ± 0.01

*Abundance (relative to the sum of Na⁺ and Mg⁺) of the sum of ions and molecular ions listed in column 2. Uncertainties are dominated by limited counting statistics.

Tableau 2 : Rapports d'abondance des ions présents dans l'exosphère de Mercure. (Zurbuchen et al. 2008).

2.3.Ganymède

Ganymède représente une situation intermédiaire entre Mercure, où les faibles densités sont tellement faibles qu'elles permettent de négliger les collisions, et Mars où l'exosphère est l'extension d'une atmosphère collisionnelle.

L'émission de l'oxygène atomique a été observée par le High Resolution Spectrograph du Hubble Telescope (HST), ce qui a permis de mettre en évidence la présence d'O₂ (densités de colonne entre 10¹⁴ et 10¹⁵ O₂/cm²) dans l'environnement de Ganymède (Hall et al. 1998). La sonde Galilée a également pu mettre en évidence la présence d'hydrogène en mesurant les raies du Lyman α (Barth et al. 1997). D'autre part, l'existence d'aurores polaire a montré la relation entre l'exosphère et la magnétosphère de Ganymède (Feldman et al. 2000). L'atmosphère de Ganymède est très ténue, d'où le fait qu'elle soit majoritairement non-collisionnelle. Les seuls processus qui alimentent cette atmosphère sont des mécanismes d'érosion de la surface par des agents extérieurs, photons et particules énergétiques.

Sur Ganymède, l'interaction de la surface avec le vent solaire ne peut pas se produire car celle-ci est protégée par la magnétosphère de Jupiter. Cependant les particules énergétiques du plasma jovien vont interagir avec la surface de Ganymède. Le criblage de Ganymède par les particules énergétiques du plasma jovien ne va pas se faire sur toute la surface (*Figure II-8*) puisque la magnétosphère de Ganymède protège la surface au niveau des basses latitudes. Au-delà de +/- ~45° de latitude, les lignes de champs sont ouvertes et les particules atteignent la surface (Khurana et al. 2007). La *Figure II-8* représente la magnétosphère de Ganymède avec les lignes de champs ouvertes au niveau des pôles.

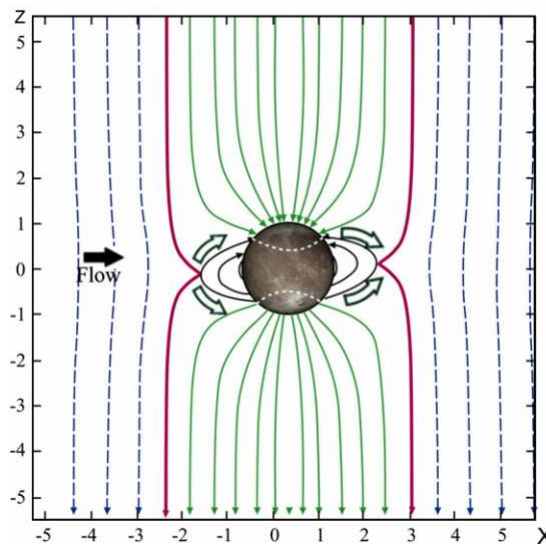


Figure II-8 : Représentation des lignes de champ autour de Ganymède. Les flèches blanches montrent le trajet des lignes de champ jovien. La flèche noire montre la direction d'arrivée du plasma jovien (Khurana et al. 2007).

Le flux moyen de molécules d'H₂O éjectées dans les régions polaires est

$$F_{\text{sputt}}(\text{H}_2\text{O}) = 1.8 \times 10^8 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} \text{ (Marconi et al. 2007).}$$

La fonction de distribution de l'énergie nous est donnée par la formule suivante (Shematovich et al. 2005) :

$$f(E) = \frac{2EU_0}{(E + U_0)^3} \quad (II-7)$$

où $U_0 = 0.055$ eV est une énergie de liaison.

Il ne s'agit pas d'une fonction de distribution thermique, car les particules sont éjectées par un processus très énergétique et n'ont pas le temps de se thermaliser avec la surface. L'une des caractéristiques de cette distribution est sa queue supra-thermique très importante, bien plus conséquente que dans le cas de particules éjectées thermiquement. On pourra ainsi produire des molécules d' H_2O jusqu'à plus de 4 eV.

La structure verticale de l'atmosphère de Ganymède a la particularité de ne pas être uniforme sur toute la surface (Figure II-9). D'après Marconi et al. (2007), au niveau du point subsolaire, la zone allant de la surface jusqu'à ~50km est constituée d'une petite atmosphère avec une région collisionnelle (Figure II-1). Cette structure est présentée sur la Figure II-9 par le biais de la variation du nombre de Knudsen (section 1.2 du chapitre II, équation II-6).

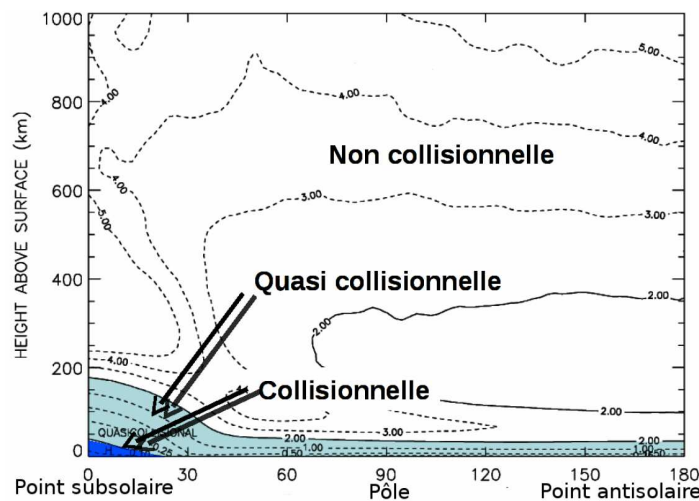


Figure II-9 : Variation du nombre de Knudsen dans l'atmosphère de Ganymède (Marconi et al. 2007)

La petite atmosphère au point subsolaire s'explique par la sublimation de la glace d'eau en surface. La sublimation donne lieu à des particules thermiques. Une carte de la température de surface de Ganymède a été fournie par les observations du photopolarimètre-radiomètre (PPR) de Galileo (Orton et al. 1996). Un ajustement de cette carte, effectué par Marconi et al. (2007), nous donne la relation suivante :

$$T_s(\theta, \varphi) = 70(\cos \varphi \sin \theta)^{\frac{3}{4}} + 80 \text{ (côté jour)}$$

$$T_s = 80K \text{ (côté nuit)}$$

où θ est la colatitude et φ la longitude.

Ce qui nous donne un maximum de température au point subsolaire ($\theta = \frac{\pi}{2}$ et $\varphi = 0$) de 150K, et une température minimum, constante sur toute la face nocturne, de 80K.

Le flux de particules sublimées peut être estimé par la relation (Marconi et al. 2007) :

$$F(\theta, \varphi) = 1.1 \times 10^{31} T_s(\theta, \varphi)^{-0.5} \exp\left(\frac{5737}{T_s(\theta, \varphi)}\right) \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

La sublimation ne concerne que les molécules d'H₂O, les autres particules étant éjectées uniquement par criblage ou formées par dissociation des molécules atmosphériques. La sublimation produit des particules dont l'énergie est proche de l'énergie thermique de la surface.

L'exosphère est constituée de tous les composés de la famille de l'eau. La *Figure II-10* suivante met en exergue la densité de molécules d'eau vue à travers deux plans en coupe différents.

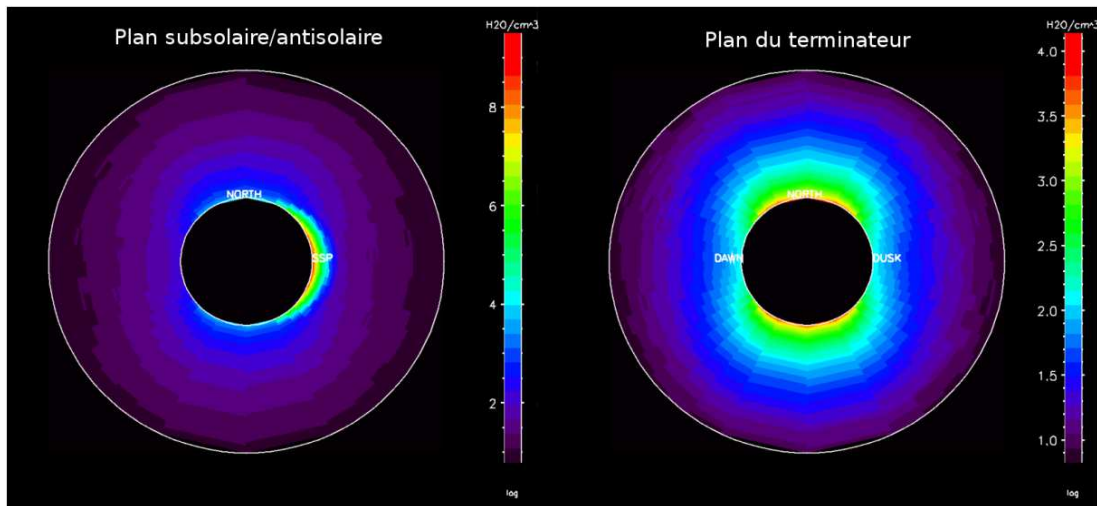


Figure II-10 : Densité de H₂O en cm⁻³ dans le plan subsolaire/antisolaire (gauche) et dans le plan du terminateur (droite) (Turc et al. 2013)

La sublimation est le principal processus de peuplement de l'exosphère de molécule d'eau, ce qui explique une densité avoisinant les 10⁹ H₂O/cm³ près du point subsolaire contre seulement 10⁴ H₂O/cm³ aux pôles. L'hydrogène monoatomique, quant à lui, n'est produit à la surface que par criblage. Cependant, les réactions de dissociation de molécules d'eau produisent aussi de l'hydrogène monoatomique au niveau du point subsolaire. Le maximum de densité pour l'hydrogène se situe au niveau du point subsolaire comme pour les molécules d'eau, 10⁴ H/cm³ contre 3×10² H/cm³ aux pôles. Cette densité est due à la réaction de photodissociation de H₂O qui compte un taux 10 fois plus important par rapport aux autres réactions. Les profils des molécules de O et OH présentent des similitudes avec H avec leur maximum au niveau du point subsolaire. Ces deux espèces sont aussi les produits de la réaction de photodissociation de molécules d'eau. Le dihydrogène est principalement produit par criblage ; la particularité de cette molécule étant qu'elle se thermalise avec la surface. De ce fait, H₂ va s'accumuler du côté nuit de Ganymède car les trajectoires balistiques après rebonds sont plus courtes de ce côté.

La Figure II-11 montre bien une différence de quasiment un ordre de grandeur entre le côté jour et nuit de Ganymède. On note malgré tout que dans le plan du terminateur, la densité est homogène sur toute la surface.

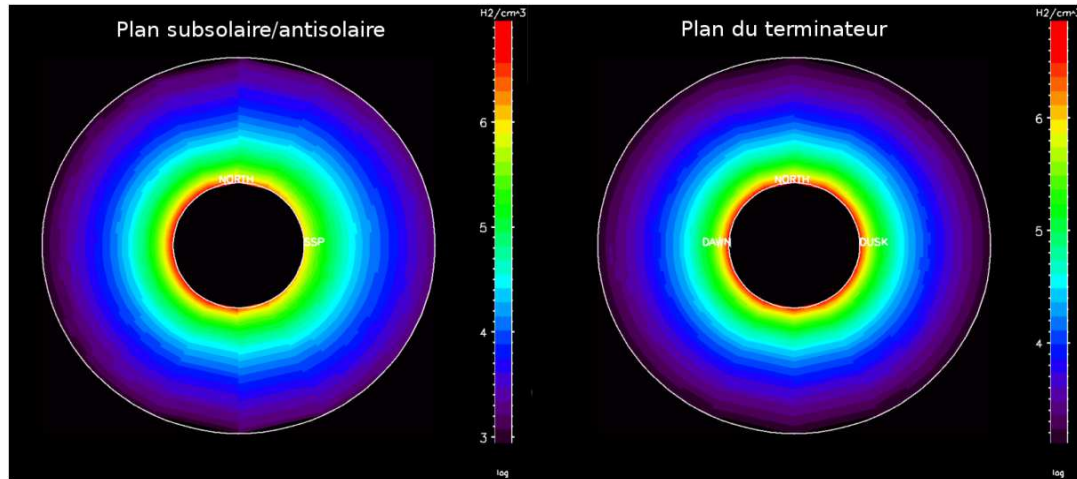


Figure II-11 : Densité de H₂ dans le plan antisolaire/subsolaire (gauche) et dans le plan du terminateur (droite). (Turc et al. 2013)

L'énergie nécessaire aux particules pour s'échapper de l'attraction gravitationnelle est difficilement atteignable pour le mécanisme de sublimation de la surface. En revanche, dans le processus de criblage, 12% de cette population dispose de l'énergie nécessaire pour s'échapper.

Résumé du Chapitre II

Afin de caractériser les interactions entre les corps planétaires et leur environnement, l'analyse des particules supra-thermiques permet de reconstruire les principaux mécanismes donnant lieu à la modification de l'atmosphère ou surface de ces objets. Ces particules sont des traceurs de la maturation et de l'évolution de la planète. Plusieurs processus donnent lieu à la formation de particules neutres exosphériques, comme le criblage et la recombinaison dissociative sur Mars. Sur Mercure, les principaux processus de formation sont le criblage, la désorption par stimulation photonique et par évaporation ainsi que l'impact météoritique. Sur Ganymède, la sublimation et le criblage sont les deux processus majoritaires de peuplement de l'exosphère. L'énergie attribuée par chacun de ces processus est une signature importante qui permet non seulement d'identifier le processus mais aussi son effet érosif. La densité donne une information sur l'importance de ces processus pour la modification de ces corps. Enfin, la distribution spatiale de ces particules détermine les régions principales soumises à ces processus, comme par exemple la sublimation dans la région subsolaire et le criblage aux pôles sur Ganymède. Par ailleurs, les processus mis en jeu sont susceptibles de former plusieurs espèces, leur identification se trouvant être le dernier paramètre important pour l'identification et la caractérisation de ces processus.

Pour résumer ; l'énergie, la densité, la structure spatiale et la composition sont les paramètres à mesurer pour caractériser les processus les plus énergétiques susceptibles de modifier sur le long terme les objets planétaires dans notre système solaire.

III. Spectrométrie de masse pour l'exploration des environnements planétaires

1. Objectifs instrumentaux

Dans la section précédente, nous avons décrit l'environnement de 3 corps planétaires du système solaire. La caractérisation de l'échappement atmosphérique présent et passé est l'une des questions fondamentales de l'exploration martienne (MAVEN, Jakovsky 2012). Observer l'exosphère constitue donc une des approches pour observer cet échappement. Sur Ganymède et Mercure, l'interaction directe de l'environnement externe avec la surface modifie la composition de la surface et érode celle-ci. L'analyse des éjectas permettrait de comprendre les différents modes d'érosion provoqués par cette interaction. L'une des premières difficultés pour reconstruire l'échappement atmosphérique et/ou les mécanismes d'érosion d'une surface consiste à pouvoir déterminer les mécanismes physiques à leur origine. Dans les régions les plus appropriées à l'observation de ces phénomènes coexistent des particules de différents types : supra-thermiques et thermiques (voir section 1 et 2 du chapitre II). Un profil de densité typique de ces populations tel qu'il a été déduit de l'observation autour de Mars (Feldman et al. 2011) est mis en avant sur la Figure III-1.

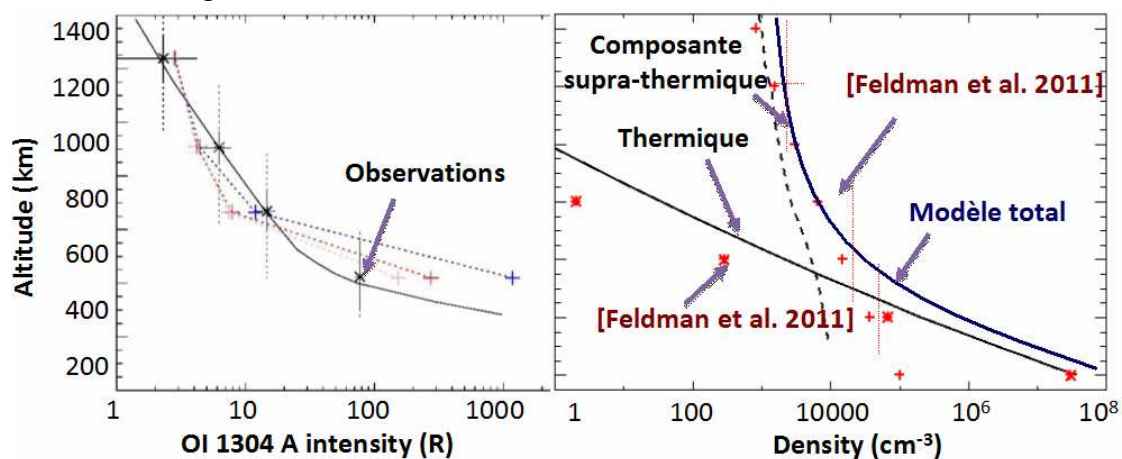


Figure III-1 : Profil de la densité de l'oxygène exosphérique martien. La figure de gauche montre l'intensité de l'émission de l'oxygène atomique observée par la sonde Rosetta lors de son fly-by de Mars. Croix avec barres d'erreur : mesures effectuées par ALICE, trait plein : profil d'émission reconstruit à partir d'un modèle de densité (Feldmann et al. 2011). Traits pointillés : reconstitution de l'émission pour différents champs de vue (Yagi et al. 2012).. La figure de droite représente quant à elle un modèle de la densité de l'oxygène atomique qui reproduit les observations. Ce profil est décomposé en une composante thermique et une composante supra-thermique (Yagi et al. 2012)

A basses altitudes, les populations thermiques dominant et les collisions ainsi que la densité sont importantes ; nous sommes dans l'atmosphère. Il existe cependant une altitude à laquelle la population supra-thermique domine la population thermique. Typiquement autour de 600km autour de Mars pour l'oxygène atomique (Figure III.1 ; Chaufray et al. 2007), cette altitude est par contre très variable autour de Ganymède ou Mercure. L'approche la plus simple pour observer ces particules supra-thermiques consiste donc à réaliser une mesure à haute altitude. Cela correspond néanmoins à des altitudes où les densités devenant très faibles sont particulièrement difficiles à mesurer. Ainsi, il est plus approprié de réaliser une mesure à basse altitude correspondant à la zone où les densités sont plus importantes. Le seul moyen d'être alors sûr de mesurer des particules suprathermiques est de pouvoir différencier l'énergie des particules. Une synthèse des énergies et densités des différents éléments à analyser en fonction des corps étudiés (Mars, Mercure et Ganymède) sont donnés dans les tableaux suivants.

Eléments (masse)	Densité (cm ⁻³) (375 km-270 km)	Energies	
		RD	Criblage
O (16)	200-1200	0-5eV	0-30
CO (28)	18-800	0-4eV	0-20
CO ₂ (44)	40-1500	0-3.5eV	0-20
C (12)	4-200		0-10

Tableau 3 : Caractéristiques des particules suprathermiques de l'exosphère à mesurer sur Mars telles que produites par les deux principaux processus de formation de particules suprathermiques. Les densités correspondent à une mesure à 270km au minimum d'activité solaire et 375km au maximum d'activité solaire (Thèse F. Cipriani 2006).

Eléments (masse)	Densité (cm ⁻³)	Energies (eV)
Na (23)	~ 10 ⁴	>0.08
Mg (24)	~ 10 ³	>0.85
O (16)	~ 10 ⁴	
H (1)	~ 10 ²	0.06
Ca (40)	~ 10 ²	>0.85

Tableau 4 : Caractéristiques des principaux constituants de l'exosphère à la surface de Mercure (Leblanc et al. 2007).

Eléments (masse)	Densité (cm ⁻³)	Energies (eV)
H (1)	~ 10 ²	~ 0-2.8
H ₂ (2)	~ 10 ⁶	~ 0-0.25
OH (17)	~ 10 - 10 ⁴	~ 0-19.8
H ₂ O (18)	~ 10 ² - 10 ⁷	~ 0-21
O ₂ (32)	~ 10 ² - 10 ⁴	~ 0-10.5

Tableau 5 : Caractéristiques des principaux constituants de l'exosphère à la surface de Ganymède (Turc et al. 2013 ; Marconi et al. 2007).

Notre objectif est donc d'obtenir un instrument permettant de

- **Déterminer la nature des constituants majoritaires dans l'exosphère, c'est à dire leur masse avec une résolution de l'ordre de 30.**
- **Mesurer les énergies sur une gamme de 0 à quelques eV afin de différencier les particules thermiques et suprathermiques.**
- **Obtenir une résolution spatiale et temporelle suffisante pour dissocier variation temporelle et spatiale.**
- **Pouvoir mesurer de faibles densités $< 10^8 \text{ cm}^{-3}$.**

L'utilisation de la spectroscopie devient indispensable pour caractériser un milieu. Plusieurs types d'analyses spectroscopiques existent et il nous a d'abord été nécessaire de choisir la technique la plus adéquate pour le type de mesure spécifique dont nous avons besoin. Il y a essentiellement deux grandes techniques de mesure possible : à distance ou in situ. L'observation à distance se fait à travers la mesure du spectre électro-magnétique et plus spécifiquement pour l'observation des atmosphères et exosphères par l'utilisation de la spectroscopie IR, UV visible etc. qui mesure l'émission lumineuse des particules atmosphériques (émissions résonante, vibrationnelle, rotationnelle...). La mesure in situ est quant à elle basée sur une large gamme d'instrumentation, couvrant l'analyse chimique (chromatographie ou spectrométrie de masse par exemple), la mesure des ondes électromagnétiques (antennes électriques, magnétomètre, etc.) ou du plasma (mesure du bruit thermique, spectrométrie électron, etc.).

Comme montré au chapitre II, la mesure de l'énergie des particules se révèle particulièrement intéressante car l'énergie va nous informer quant à l'échappement ou non de la particule¹ et la nature du processus qui lui a donné cette énergie. Une mesure in situ est donc indispensable pour ce type de mesure. Les mesures à distance pouvant fournir cette information étant limitées en sensibilité n'apparaissent pas adaptées aux milieux très peu denses comme les objets de notre étude. Pour la même raison, à savoir la mesure d'énergie, la chromatographie n'est pas utilisable. La seule technique disponible aujourd'hui pour couvrir les objectifs scientifiques du chapitre II est donc la spectrométrie de masse. Pour caractériser un plasma ou un environnement neutre, c'est à dire en connaître la densité, la composition, les énergies et la distribution spatiale, il faut reconstituer la fonction de distribution qui définit ces paramètres dans l'espace des phases. Pour un spectromètre de masse et d'énergie, le champ de vue est optimisé de sorte qu'un maximum de particules puisse entrer dans l'instrument. L'exercice va ensuite consister à déterminer la fonction de distribution des particules dans le plasma en fonction des mesures réalisées par l'instrument. Plus le champ de vue est grand, plus il sera facile de reconstituer la fonction de distribution. La section suivante explique le passage de la fonction de distribution aux mesures expérimentales.

¹ Une particule est considérée comme s'échappant lorsque son énergie cinétique à l'exobase est supérieure à l'énergie potentielle gravitationnelle et la composante radiale de son vecteur vitesse est positive.

2. De la fonction de distribution aux mesures instrumentales

La fonction de distribution des particules est définie comme la densité dans l'espace des phases (x, y, z, v_x, v_y, v_z) en un point $(\vec{r}, \vec{v})$, à un instant t :

$$f(m, \vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{dN}{dx dy dz dv_x dv_y dv_z} \quad (III-1)$$

Les 3 premiers moments de cette fonction de distribution définissent trois grandeurs macroscopiques :

o la densité :

$$n(m, \vec{r}, t) = \int f(m, \vec{r}, \vec{v}, t) d^3v \quad (III-2)$$

o la vitesse moyenne :

$$\vec{v}_D = \frac{1}{n} \times \int \vec{v} f(m, \vec{r}, \vec{v}, t) d^3v \quad (III-3)$$

o la température :

$$T = \left(\frac{m}{3k_B n} \right) \times \int (\vec{v} - \vec{v}_D)^2 f(m, \vec{r}, \vec{v}, t) d^3v \quad (III-4)$$

Ces 3 paramètres sont suffisants pour étudier la dynamique d'un plasma à l'équilibre thermodynamique que l'on peut représenter par des fonctions de distributions maxwelliennes. Lorsque nous sommes dans un cas hors équilibre thermodynamique (comme un plasma composé d'un mélange de particules thermiques et suprathermiques par exemple), la mesure détaillée de la fonction de distribution devient indispensable ou l'introduction de moments d'ordre supérieurs nécessaire (flux de chaleur...).

Du point de vue d'un instrument se trouvant dans un milieu quelconque, ce dernier verra un flux de particules noté $J(m, q, \vec{v}, E, t, \vec{r})$ dont l'intensité dépend en particulier de la direction et de l'énergie considérées :

$$J(m, q, \vec{v}, E, t, \vec{r}) = \frac{dN}{dS \cdot \cos \theta d\Omega \cdot dE \cdot dt} \quad (III-5)$$

où dN représente le nombre de particules de masse m , de charge q , d'énergie comprise entre E et $E + dE$ dont le vecteur vitesse est contenu dans un angle solide $d\Omega$ autour de la direction d'arrivée des particules, qui traversent pendant un instant dt une surface dS dont la surface fait un angle θ avec le vecteur vitesse.

En considérant un milieu homogène à l'endroit où la mesure se fait, le théorème de Liouville permet de relier la fonction de distribution au flux de particules analysé :

$$f(m, q, \vec{v}, E, t) = J(m, q, \vec{v}, E, t) \times \frac{m^2}{2E} \quad (III-6)$$

Le champ de vue $\Delta\Omega$ d'un spectromètre plasma va correspondre à une intégration du flux de particules dans un certain domaine de l'espace des phases, avec une bande passante en énergie ΔE le tout sur une surface totale S en entrée. Cette mesure est réalisée pendant un temps Δt durant lequel nous supposons que la fonction de distribution et le flux sont constants, d'où une obtention de valeurs moyennes des grandeurs macroscopiques pour un temps d'intégration donné.

Pour un ensemble de particules de masse m , de charge q , d'énergie comprise entre $E + \Delta E/2$ et $E - \Delta E/2$ dont le vecteur vitesse est compris dans l'angle solide $d\Omega$ entrant dans le spectromètre à travers une surface élémentaire $dxdy$ en (x, y) , deux grandeurs sont introduites pour fournir la probabilité de détection :

- la probabilité p_1 d'atteindre le détecteur,
- la probabilité p_2 d'être détectée par le système de détection.

p_1 va dépendre des caractéristiques de la particule et $p_1(m, q, E, x, y, \theta, \phi) = 0$ ou 1 , où ϕ est l'azimuth du vecteur vitesse. p_1 vaut alors 0 lorsque la particule impacte une partie de l'optique de l'instrument.

Les détecteurs principalement utilisés fonctionnent avec une galette à micro-canaux (MCP, voir section 3.3.1 du chapitre IV), dont la probabilité d'éjections d'électrons secondaires dépend des caractéristiques de la particule impactant les MCP.

Finalement, le nombre de particules détectées par l'instrument peut s'écrire :

$$N = \Delta t \int \int_{S \Delta\Omega E-\Delta E/2}^{E+\Delta E/2} p_1 \cdot p_2 \cdot J \cdot \cos \theta dx dy d\Omega dE \quad (III-7)$$

Partant de l'hypothèse d'une population uniforme sur la surface d'entrée de l'instrument, le flux ne dépend pas de la position à l'entrée. On obtient alors :

$$N = \Delta t \int_{\Delta\Omega E-\Delta E/2}^{E+\Delta E/2} J \cdot \cos \theta d\Omega dE \int_S p_1 \cdot p_2 dx dy \quad (III-8)$$

L'intégrale $\int_S p_1 \cdot p_2 dx dy$ correspond à la surface effective S_{eff} de détection pour le groupe (m, q, E, θ, ϕ) qui pénètre dans l'instrument. De façon équivalente, il est possible de définir pour ces particules la transparence de l'instrument $T(m, q, E, \theta, \phi)$ par :

$$S_{eff}(m, q, E, \theta, \phi) = T(m, q, E, \theta, \phi) \cdot S \quad (III-9)$$

ce qui donne l'expression :

$$N = S \cdot \Delta t \int_{\Delta\Omega E-\Delta E/2}^{E+\Delta E/2} J \cdot T(m, q, E, \theta, \phi) \cdot \cos \theta d\Omega dE \quad (III-10)$$

L'instrument va mesurer N pour différentes directions d'arrivée et énergies, ce qui va permettre de déterminer le flux en fonction des paramètres E, θ et ϕ pour un couple (m, q) donné en inversant la dernière équation intégrale si $T(m, q, E, \theta, \phi)$ est connue. La détermination de la fonction $T(m, q, E, \theta, \phi)$ va se faire expérimentalement par l'étalonnage de l'instrument.

L'obtention rapide d'une valeur approchée de l'angle solide $\Delta\Omega$ est possible en réalisant deux balayage angulaires α et β dans deux plans perpendiculaires englobant la normale à la surface d'entrée S . Au moyen des largeurs à mi-hauteur $\Delta\alpha$ et $\Delta\beta$ des courbes $N(\alpha)$ et $N(\beta)$, on obtient une approximation de l'angle sous la forme :

$$\Omega \approx \frac{\pi}{4} \Delta\alpha \Delta\beta \quad (III-11)$$

Les paramètres $\Delta\alpha$ et $\Delta\beta$ sont appelés acceptances angulaires. On peut déduire qu'en considérant J constant sur $[E - \Delta E/2, E + \Delta E/2]$ et sur $\Delta\Omega$:

$$N \approx \Delta t \cdot T_0 \cdot \Delta E \cdot S \cdot \frac{\pi}{4} \Delta\alpha \Delta\beta \cdot J \quad (III-12)$$

où ΔE représente la largeur à mi-hauteur de la courbe $N(E)$ et T_0 la transparence dite "centrale" pour le groupe $T(m, q, E_0, \theta_0, \phi_0)$.

L'expression $S \cdot \frac{\pi}{4} \Delta\alpha \Delta\beta$ représente le facteur géométrique de l'instrument qui détermine la sensibilité de celui-ci, exprimée alors en $cm^2 \cdot st$. Une autre variante du facteur géométrique consiste à ajouter la résolution en énergie $\Delta E/E$ dans l'équation, qui devient alors $S \cdot \frac{\pi}{4} \Delta\alpha \Delta\beta \Delta E/E$ et s'exprime alors en $cm^2 \cdot st$.

Dans le cas de l'analyse d'une population neutre ($q = 0$), la caractérisation de l'instrument est un peu différente. En effet, ce sont surtout les propriétés de la source d'ionisation qui vont nous permettre de définir un facteur géométrique équivalent. En fait, on ne parlera pas de facteur géométrique dans ce cas mais uniquement de transparence. Une fois le flux de particules neutres entrant dans le volume d'ionisation calculé (d'une manière quelque peu similaire à l'approche précédente), on en déduit la densité neutre équivalente vue par l'instrument. Il faut alors considérer les caractéristiques de la technique d'ionisation. Par exemple, dans le cas d'une source d'ionisation basée sur l'émission d'électrons, on considérera deux paramètres supplémentaires ; l'énergie typique des électrons dans le volume d'ionisation et leur flux. Par exemple, dans le cas de la source d'ionisation utilisée pour analyser les populations neutres sur Mars ou Ganymède, on utilisera une énergie d'électrons autour de 70 à 100 eV ce qui maximalise l'efficacité d'ionisation (voir section 3.2.1 du chapitre IV). Le taux d'ionisation d'une population donnée dépendra alors de la section efficace d'ionisation de l'espèce. Par exemple,

$$\sigma_{H_2O}(E_e = 70eV) = 2.0 \times 10^{-16} cm^2 \text{ (Shirai et al. 2001),}$$

$$\sigma_{O_2}(E_e = 70eV) = 2.5 \times 10^{-16} cm^2 \text{ (Krishnakumar et al. 1992) et}$$

$$\sigma_O(E_e = 70eV) = 1.2 \times 10^{-16} cm^2 \text{ (Cravens et al. 1987).}$$

Ce taux s'exprimera pour une espèce X par la formule :

$$R_X = N_X \times \sigma_X(E_e = 70eV) \times I \times \frac{I_e}{q} \quad (III-13)$$

avec N_x la densité neutre en particules/cm³, I la longueur parcourue par les électrons dans le volume d'ionisation et I_e le courant d'électrons émis dans le volume d'ionisation, q étant la charge de l'électron et R_x est équivalent au terme J de l'équation III-5. Dans le cas d'un spectromètre de masse neutre, on parlera donc plutôt de transparence de l'instrument et d'efficacité d'ionisation de la source d'ionisation que de facteur géométrique comme dans le cas d'un instrument plasma.

3. La spectrométrie de masse, techniques existantes

Un spectromètre de masse se compose de deux parties : la source et l'analyseur. La source permet d'ioniser le composé pour ensuite pouvoir l'analyser. Dans le domaine spatial, l'étude se fait généralement dans un plasma, l'instrument se réduisant donc à sa partie analyseur. Dans le cadre de cette thèse, l'un des instruments développé devra analyser des particules neutre, d'où la nécessité d'une source d'ionisation qui sera décrite dans la section 4 du chapitre IV. La partie analyseur détermine la masse et/ou l'énergie des particules qui entrent dans l'instrument selon diverses méthodes en fonction du concept choisi. Il existe 5 grandes classes d'analyseurs permettant de donner la masse des particules et une technique d'analyse de l'énergie. Nous allons les décrire brièvement avant d'introduire les choix qui ont été faits pour NIMEIS.

3.1. L'analyseur magnétique

Un analyseur magnétique sépare les rapports m/q basés sur la déviation des trajectoires de particules ionisées dans un secteur magnétique (Nier 1940). Le mouvement d'une particule de charge q , de masse m et de vitesse v dans un champ magnétique est régi par la force de Lorentz :

$$\vec{F} = q\vec{v} \wedge \vec{B} \quad (\text{III-14})$$

Dans le secteur magnétique, la force $\vec{F}$ est perpendiculaire aux vecteurs vitesse et champ magnétique : la trajectoire des ions est plane et située dans un plan perpendiculaire à B et contenant le vecteur vitesse. La trajectoire de la particule est alors circulaire avec un rayon r de :

$$r = \frac{mv}{qB} \quad (\text{III-15})$$

L'utilisation d'aimants de forme circulaire impose une direction au mouvement des particules en fonction de leur quantité de mouvement. Connaissant la tension d'accélération des particules à l'entrée de l'analyseur, une seule masse pourra atteindre le détecteur, les autres masses impacteront les parois de l'aimant. Pour connaître toutes les masses qui se trouvent dans le composé, un balayage en tension d'accélération doit être réalisé.

L'utilisation d'aimants augmente fortement le poids de l'instrument. Une évolution de cet analyseur consiste à augmenter l'espace entre les deux aimants (l'entrefer), permettant ainsi de laisser passer plusieurs masses qui impacteront une zone particulière du détecteur en sortie de l'analyseur en fonction de la masse de la particule comme le montre la *Figure III-2*.

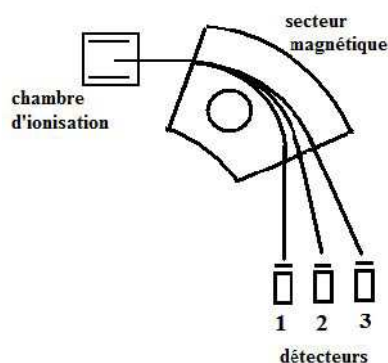


Figure III-2 : Principe amélioré d'un analyseur magnétique dans lequel une gamme en masse est acceptée dans le secteur magnétique.

L'avantage de cette méthode consiste à réaliser une mesure sur toute une gamme en masse choisie tout en évitant le temps mort sur cette gamme. L'instrument DYMIO (voir section 4.1.2 du chapitre III) utilise un secteur magnétique pour l'analyse en masse. La Figure III-3 montre une vue en coupe de l'instrument, les trajectoires de particules sont calculées pour une masse donnée. La zone d'impact sur le détecteur permet d'obtenir la masse de la particule.

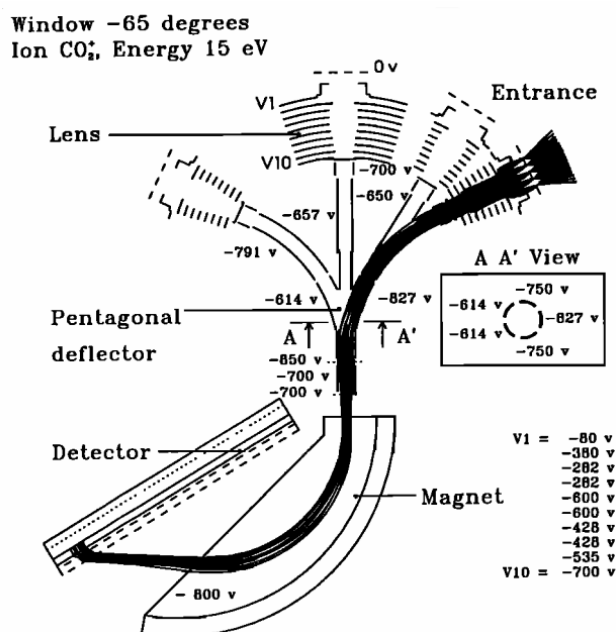


Figure III-3 : Principe de fonctionnement de l'instrument DYMIO dont l'analyseur en masse est composé d'un secteur magnétique (Bertheliet al. 1998).

3.2. Le quadropôle

Un quadropôle est composé de 4 barres de section cylindrique ou hyperbolique placées parallèlement à l'axe du faisceau de particules de façon symétrique comme le montre la Figure III-4 (Paul 1990).

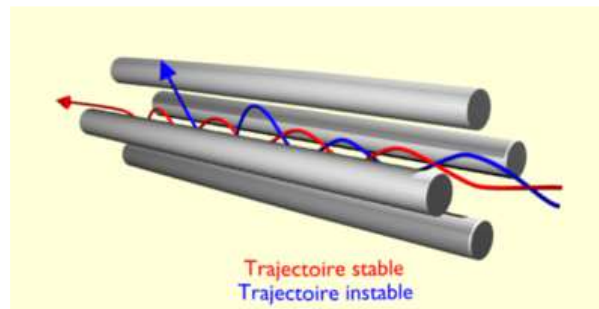


Figure III-4 : Principe de fonctionnement d'un analyseur quadrupôle.

Chaque paire d'électrodes opposées se voit appliquer le même potentiel composé d'un potentiel continu et d'une variation dans le temps. Ce potentiel fluctue selon l'équation suivante sur une paire symétrique d'électrodes :

$$F(t) = u + v \times \cos(\omega \times t) \quad (III-16)$$

u représente l'amplitude de la tension continue, v l'amplitude de la tension haute fréquence et ω la pulsation (fréquence de l'ordre de 2 MHz).

Sur l'autre paire, on applique la variation $-F(t)$. Les ions sont introduits à une extrémité de l'analyseur selon l'axe du quadrupôle. Les champs continus et de haute fréquence dont les directions sont perpendiculaires à l'axe du filtre communiquent un mouvement latéral oscillatoire aux ions. Le mouvement des ions est décrit par des équations, dites de Mathieu (March 1997), dont la résolution montre que seuls les ions ayant une valeur du rapport m/q comprise dans une certaine bande possèdent une trajectoire stable et parviennent à l'autre extrémité de l'analyseur, les autres ions étant interceptés par les électrodes. Ce rapport m/q dépend de la distance séparant les électrodes, de la fréquence et des tensions u et v . En pratique, puisque les deux premières valeurs sont constantes, seules varient les tensions u et v . En balayant les amplitudes des tensions continues et de hautes fréquences appliquées aux électrodes, les ions sont détectés successivement dans l'ordre croissant des valeurs du rapport m/q , avec une résolution constante. L'inconvénient de cet instrument, comme le précédent, réside dans le fait de devoir balayer en tension pour pouvoir couvrir une fenêtre en masse. L'instrument INMS (pour Ion and Neutral Mass Spectrometer) de la mission Cassini (Waite et al. 2004) utilise ce type d'analyseur pour réaliser les mesures en masse. La Figure III-5 montre le design de l'instrument.

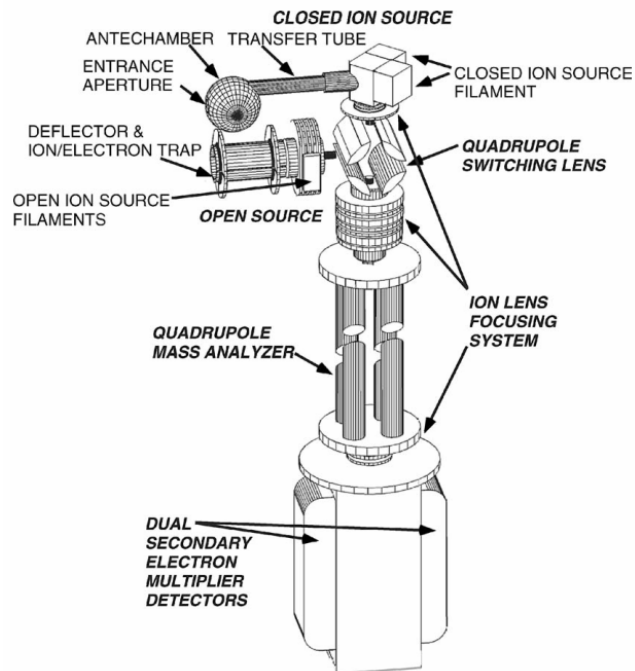


Figure III-5 : Vue schématique de l'instrument INMS de la mission Cassini (Waite et al. 2004)

Le temps de balayage complet en masse de l'instrument est de ~ 31 ms.

3.3. La trappe ionique

Une trappe ionique se base sur le même principe que le quadropôle, mis à part que les électrodes forment un volume en 3D dans lequel les particules ionisées vont être piégées (March 1997). Une trappe ionique est constituée d'une électrode annulaire et de deux électrodes "chapeau" comme le montre la Figure III-6.

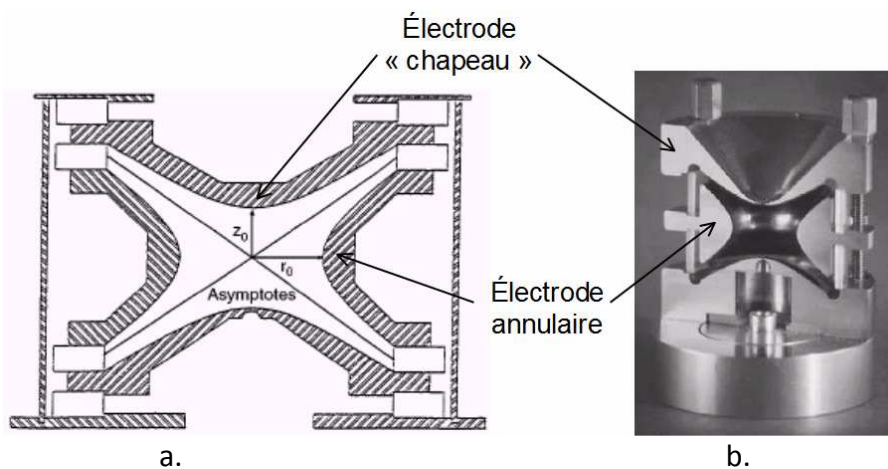


Figure III-6 : a. Vue en coupe de la trappe à ion. b. Photo d'une trappe à ion ouverte dans laquelle l'on peut voir les deux sortes d'électrodes.

Le mouvement des ions en 3 dimensions à l'intérieur du piège dépend de la masse m de l'ion ainsi que de sa charge q . Il existe des zones de stabilité dans lesquelles des ions de masse m peuvent avoir un mouvement vibratoire stable et donc rester piégés dans la trappe ionique. Les ions sont d'abord tous piégés à l'intérieur de la trappe, confinés dans une certaine gamme de masse puis éjectés sélectivement en direction du détecteur.

Le spectre de masse est obtenu en augmentant progressivement la tension pour déstabiliser les trajectoires des ions en fonction de leur masse croissante. Cet instrument est compact et précis. Néanmoins, il peut y avoir des problèmes de collisions de particules dans le volume en fonction de la densité. Un temps mort est également nécessaire pour couvrir la gamme en masse afin de vider la trappe à ions des particules présentes.

3.4. L'orbitrap

Un analyseur orbitrap est basé sur le même principe que la trappe à ion, c'est à dire l'utilisation d'un piège à ion. Celui-ci est composé d'une électrode creuse dans laquelle se positionne une électrode en forme de fuseau comme le montre la *Figure III-7*. Cette géométrie permet l'imposition d'un champ électrostatique quadropolaire avec la tension (Hu et al. 2005) :

$$U(r, z) = \frac{k}{2} \left(z^2 - \frac{r^2}{2} \right) + \frac{k}{2} Rm^2 \ln \left(\frac{r}{Rm} \right) + C \quad (III-17)$$

où Rm correspond au rayon caractéristique, k est la courbure du champ et C une constante. Les ions entrent tangentiellement à l'électrode centrale puis vont tourner autour de celle-ci. Les forces électrostatiques compensent les forces centrifuges. Selon l'axe z , les ions vont osciller en fonction de leur rapport m/q à une fréquence f donnée. La mesure de cette fréquence permet ensuite de remonter à la masse des ions par transformée de Fourier.

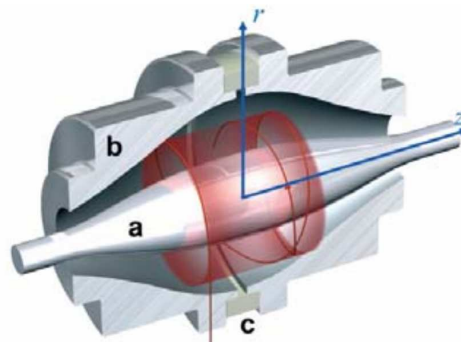


Figure III-7 : Vue en coupe d'un analyseur orbitrap, composé d'une électrode interne (a), d'une électrode externe (b) scindée en deux et maintenue ensemble par une bague en céramique (c).

Crédits american laboratory.

Cette technique est très performante car elle donne une très bonne résolution en masse allant jusqu'à 1 000 000 (Denisov 2012).

3.5. L'analyseur temps de vol

Un analyseur temps de vol (time of flight ou TOF) est, comme son nom l'indique, basé sur le principe de la détermination du temps de vol des particules qui entrent dans l'analyseur (Wiley and McLaren 1955). Cet analyseur est constitué d'un tube dans lequel est appliquée une tension d'accélération connue. La vitesse de la particule (sa masse), est liée à la tension d'accélération. L'énergie potentielle de la particule est transformée en énergie cinétique :

$$U \times q = \frac{1}{2} m \times v^2 \quad (III-18)$$

où U est la tension d'accélération, q la charge de la particule, m la masse et v la vitesse.

La particule va ensuite évoluer dans le tube où le champ est libre, l'énergie de la particule ne changeant pas. Connaissant la distance entre l'entrée du temps de vol où un chronomètre est lancé au moment où les particules entrent dans l'analyseur et l'arrivée sur le détecteur où le chronomètre est arrêté, la masse peut être déterminée ainsi :

$$U \times q = \frac{1}{2} m \times \left(\frac{d}{t} \right)^2 \quad (III-19)$$

$$t = \frac{d}{\sqrt{2U}} \sqrt{\frac{m}{q}} \quad (III-20)$$

La Figure III-8 suivante montre le principe de fonctionnement d'un analyseur temps de vol linéaire.

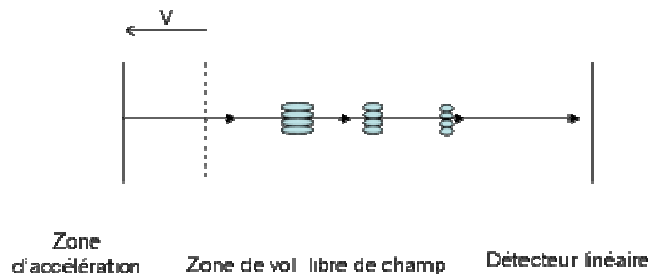


Figure III-8 : Schéma de principe de l'analyseur temps de vol linéaire.

L'avantage de cette optique est de pouvoir déterminer la masse de toutes les particules qui entrent simultanément dans l'analyseur, le balayage en masse n'étant pas nécessaire. Cependant, il faut attendre que toutes les particules soient arrivées sur le détecteur avant de recommencer une mesure. Une électronique suffisamment rapide est nécessaire pour déterminer tous les temps correspondant aux impacts sur le détecteur. Une évolution de ce principe, inventée par B.A Mamyryn en 1973, consiste à rajouter un miroir électrostatique au bout du temps de vol afin de réfléchir les particules. Dans ce cas, le détecteur va se trouver à côté de l'entrée de l'espace temps de vol. Cette géométrie porte le nom de réflectron, représenté sur la Figure III-9.

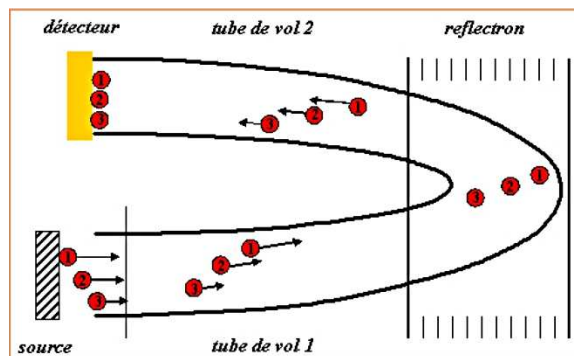


Figure III-9 : Représentation du principe de réflectron dans l'espace temps de vol. Les particules 1, 2 et 3 ont des énergies décroissantes et une masse identique. Le réflectron corrige l'écart en énergie, l'impact sur le détecteur se fait au même instant.

Les particules parcourent une distance deux fois plus grande que dans le cas d'un temps de vol linéaire. La précision sur le temps de vol est alors améliorée. Lorsque des particules entrent dans le réflectron avec des énergies qui diffèrent légèrement et une même masse, les particules plus énergétiques vont aller plus loin dans le miroir électrostatique avant d'être réfléchies. De ce fait les particules ayant des énergies quelques peu différentes, vont arriver au même moment sur le détecteur, augmentant ainsi la précision sur le temps "stop", donc la résolution en masse (Figure III-9).

A partir des différentes techniques d'analyse présentées ici, l'analyseur temps de vol offre tous les avantages pour notre type de mesure, à savoir d'augmenter le temps effectif de mesure.

Expliquons à présent le fonctionnement d'un analyseur temps de vol pour une mesure dans un plasma. Afin de déterminer le temps de vol d'une particule entrant dans l'instrument, un chronomètre doit démarrer au moment où celle-ci entre dans l'espace temps de vol. Nous appelons ce temps "start", et le moment où la particule atteint le détecteur, le temps "stop". Le temps "stop" est facilement obtenu car le moment de l'impact sur le détecteur peut être mesuré. Le temps "start", quant à lui, doit être déterminé par un moyen physique. En effet, il faut pouvoir connaître le moment exact où la particule va entrer dans l'espace temps de vol. Plusieurs procédés ont été élaborés afin de déterminer avec précision le temps "start".

La solution la plus couramment utilisée actuellement sur les missions spatiales est la feuille de carbone. A l'entrée de l'espace de dérive du temps de vol, nous plaçons une feuille de carbone perpendiculairement au faisceau de particules. Lorsqu'un ion passe à travers la feuille de carbone, celui-ci va céder un peu de son énergie et libérer des électrons secondaires en interagissant avec la feuille de carbone comme le montre la Figure III-10.

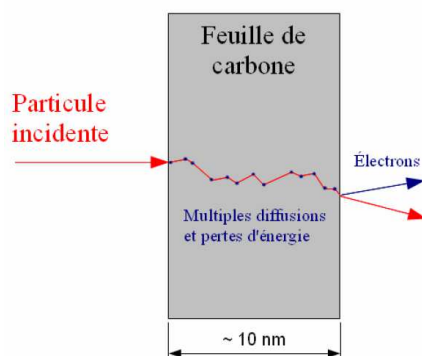


Figure III-10 : Schéma de principe de passage d'un ion à travers une feuille de carbone.

Ces électrons secondaires vont être attirés vers un détecteur à proximité proche de la feuille de carbone sans modifier les trajectoires des ions car leur énergie est faible par rapport à celle des ions. Ce signal donnera le temps "start" (Mc Comas et al. 1998). Cette solution demande une forte tension d'application (entre 15kV et 20kV) sur la feuille de carbone pour traverser celle-ci et entraîne une forte dispersion de l'ion en sortie de la feuille.

Une autre solution consiste à placer des électrodes à un endroit précis de l'instrument sur le chemin optique afin de couper les trajectoires des particules. Ces électrodes doivent être placées à un endroit où le temps de vol entre les électrodes et le détecteur sera le même quelque soient les trajectoires des particules (voir section 4.4 du chapitre V). Cela dégrade la résolution en masse mais il n'y a pas de problèmes d'interaction comme c'est le cas avec une feuille de carbone. Cependant, le fait de couper le faisceau engendre un temps mort sur la mesure qui dépend de l'instrument ainsi que la densité des éléments à mesurer. La dernière possibilité consiste à utiliser un déflecteur permettant d'éviter les temps mort (Orsini 2010) (voir section 2.3.3 du chapitre IV). L'utilisation d'une électrode de déflexion à l'entrée de l'espace temps de vol, variant son potentiel en fonction du temps, permet de dévier le faisceau et donc de déplacer l'impact sur le détecteur selon un axe du détecteur. La position de l'impact peut ensuite être reliée au potentiel de passage, dans le but d'obtenir le temps "start". Ces différentes solutions seront illustrées dans les sections suivantes.

3.6. L'analyseur en énergie électrostatique

L'utilisation d'une optique électrostatique est généralement adoptée pour dévier le faisceau et ainsi faire un balayage en énergie (même procédé que l'analyseur magnétique, excepté le fait que la déviation se fait en fonction de l'énergie et non de la masse). La géométrie la plus simple à adopter est celle de forme circulaire qui permet de faire une sélection de l'énergie avec une certaine bande passante.

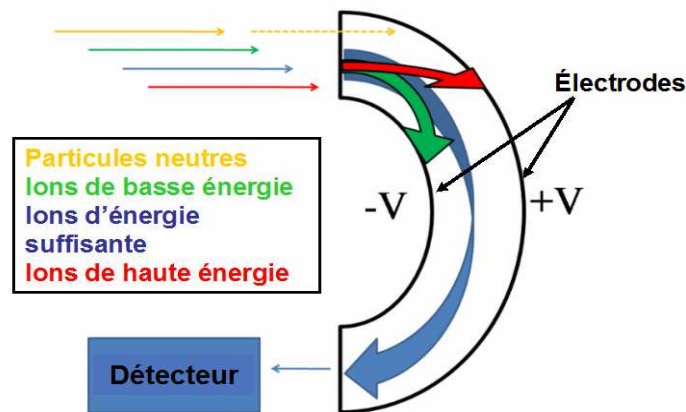


Figure III-11 : Illustration d'un analyseur en énergie électrostatique de forme circulaire.

Le champ électrique E entre 2 électrodes cylindriques ou sphériques exerce une force qE sur la particule qui va dévier la trajectoire lorsque celle-ci entre dans l'entrefer (espace entre les 2 électrodes) avec un rayon $r = \frac{mv^2}{qE}$ comme le montre la Figure III-11.

Les particules atteignent le détecteur lorsque le rapport $\frac{E}{q}$ correspond à la force qE générée par le champ. La trajectoire d'entrée (angle du vecteur vitesse par rapport à la normale à l'entrée de l'analyseur) dans l'entrefer va aussi déterminer l'arrivée ou non de la particule sur le détecteur. La gamme d'énergie possible pour une valeur de champ électrique ainsi que l'ouverture angulaire définissent la bande passante de l'analyseur. La contrainte réside dans le balayage en énergie qui augmente le temps de mesure de l'instrument.

4. Quelques exemples de spectromètres de masse dans le spatial

Dans cette section, nous présentons quelques exemples de spectromètre de masse spatialisé, ionique 4.1 et neutre 4.2 du chapitre III.

4.1. Spectromètres de masse d'ions à large champ de vue.

Comme nous l'avons vu précédemment, un spectromètre d'ions doit générer un champ de vue le plus large possible. La géométrie la plus souvent utilisée porte le nom de "top hat", développé dans les années 1980 par C.W Carlson (Carlson et al. 1983) et a été utilisé par exemple sur les instruments, CAPS sur la mission Cassini (Mc Comas and Nordholt 1990), MSA sur La mission Bepi-Colombo (Delcourt et al. 2009) ou Cluster, FAST et EQUATOR-S (Möbius et al. 1998). Comme l'indique son nom, cet analyseur à la forme d'un chapeau haut de forme.

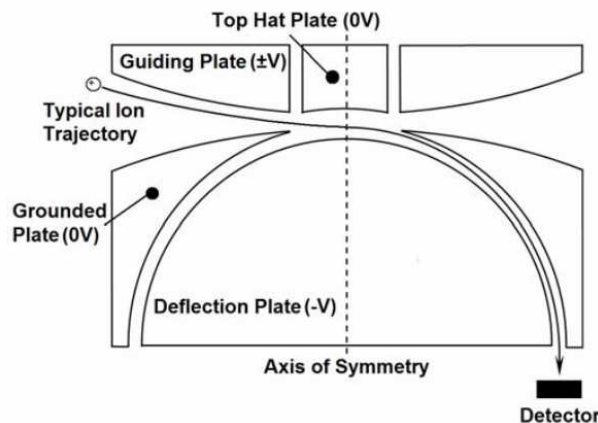


Figure III-12 : Schéma de principe d'un analyseur dit "top hat", utilisant une électrode en entrée permettant de réaliser un balayage en angle polaire. (Allen Leoraj Victor thesis 2006)

La Figure III-12 illustre le principe de fonctionnement. Le "top hat" est formé de deux électrodes sphériques où les particules entrent dans l'instrument et sont défléchies en fonction de leur énergie. Il s'agit du même principe que l'analyseur en énergie mais celui-ci offre un champ de vue de 360° autour de l'axe de révolution et de quelques degrés pour l'ouverture angulaire. En sortie de l'analyseur, on place un détecteur permettant de définir la direction d'arrivée des particules dans le plan perpendiculaire à l'axe de symétrie. Il est possible aussi de compléter l'analyse en ajoutant un spectromètre de masse en sortie de l'analyseur (comme dans le cas de MSA, section 4.1.1 du chapitre III). Les contraintes de ce type de géométrie résident dans le fait que l'ouverture angulaire est limitée à quelques degrés.

Des instruments contournant ce problème ont été optimisés comme DYMIO sur Mars 96 (voir section 4.1.2 du chapitre III), des instruments à balayage électrostatique à l'entrée de l'instrument comme présenté sur Figure III-12, ou encore PICAM sur Bepi-Colombo (voir chapitre V).

4.1.1. MSA

MSA (Mass Spectrum Analyzer) est un spectromètre de masse à temps de vol couplé à un analyseur de type "top hat". Son design est un héritage de l'instrument CAPS de Cassini (Young et al. 2004). Installé sur le module MMO (Mercury Magnetospheric Orbiter) de la mission Bepi-Colombo, MSA donnera une vue 3D de la magnétosphère ionique pour des énergies allant de quelques eV à $\sim 40\text{keV}$. Le satellite étant spinné, il permet de réaliser une mesure dans tout l'espace.

Le temps "start" est donné par la mesure des électrons secondaires lors du passage des ions à travers une feuille de carbone (Figure III-13). Un espace temps de vol composé d'un réflectron à variation linéaire du champ (voir partie 2.3.1 du chapitre IV) permet la mesure de la masse avec une résolution de 40. Une deuxième mesure des particules neutres et des électrons énergétiques en sortie de la feuille de carbone permet d'accéder à une information supplémentaire. La Figure III-13 suivante présente une vue en coupe de l'instrument.

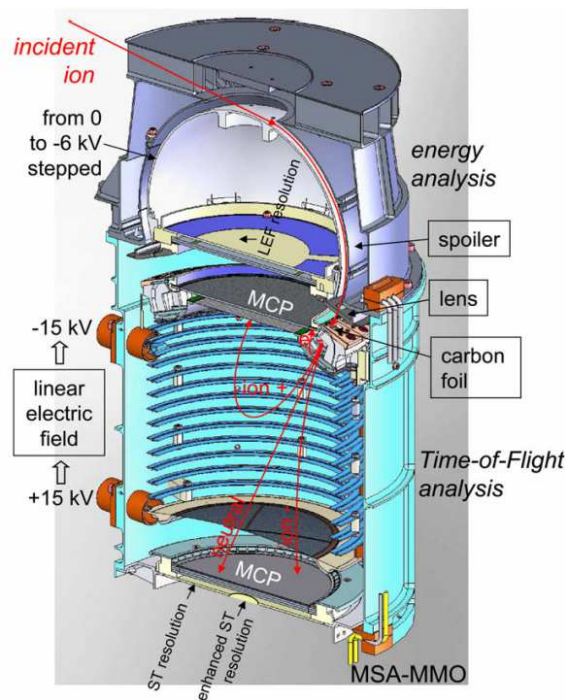


Figure III-13 : Vue en coupe de l'instrument MSA (Delcourt et al. 2009)

4.1.2. DYMIO

Lorsque le satellite ne tourne pas sur lui même (n'est pas spinné), il faut trouver une solution pour couvrir tout l'espace. DYMIO (DYnamic of the Martian IOnosphere) est un spectromètre de masse d'ions possédant une vue en 3 dimensions installé à bord de la mission Mars 96 (Berthelier et al. 1998). Celui-ci est composé de deux têtes semi-sphériques formées de 16 ouvertures de 36° chacune. Entre les deux têtes se trouve le boîtier électronique. La Figure III-14 suivante donne une vue de l'instrument.

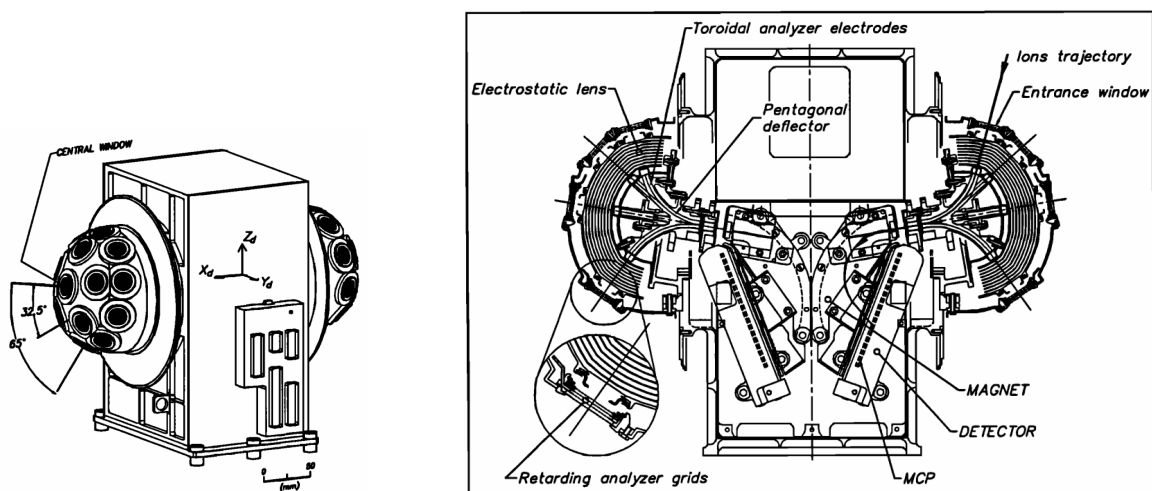


Figure III-14 : Représentation de l'instrument DYMIO. a. Vue en perspective de l'instrument. b. Vue en coupe de DYMIO (Berthelier et al. 1998).

La *Figure III-14.b* représente une vue en coupe de l'instrument. Les ions entrant dans l'instrument sont défléchis pour être concentrés en un faisceau, puis ces particules entrent dans un analyseur magnétique ayant une géométrie de Mattauch-Herzog (Mc Dowell 1963). La position de l'impact sur le détecteur selon un axe permet d'obtenir la masse de la particule. Contrairement à PICAM (voir ci-dessous), l'angle d'entrée n'est pas donné par la position de l'impact sur le détecteur.

4.1.3. PICAM

Le spectromètre de masse d'ions PICAM (Planetary Ion CAMera) de la mission BEPI-COLOMBO, a été conçu pour avoir un large champ de vue et être capable de restituer une image du champ de vue sur le détecteur. Composé d'une optique de focalisation grand angle de 90° , celui-ci offre un large champ de vue instantané d'où son nom de caméra à ion. La *Figure III-15* suivante représente l'instrument en 3D. Une étude détaillée de l'instrument est présentée dans le chapitre V.

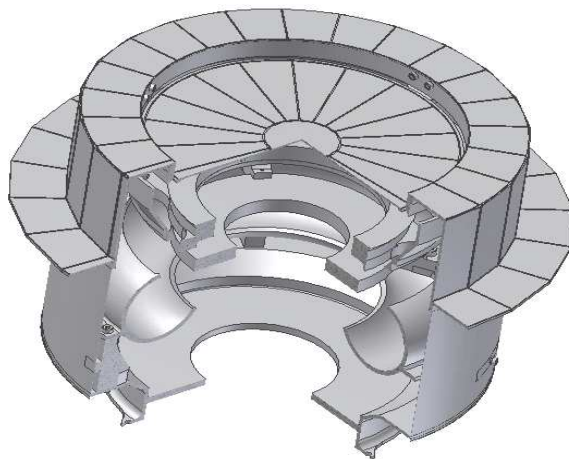


Figure III-15 : Vue 3D de PICAM.

Le *Tableau 6* suivant regroupe les principales caractéristiques des 3 instruments ions qui ont été décrits précédemment.

	MSA	DYMIO	PICAM
Gamme en énergie	5eV-40keV	0.1eV-700eV	1eV-3keV
Résolution en énergie	~10%	30eV	~10%
Champ de vue (FOV)	8°x360°	4 π , 32 fenêtres	360°x90°
Résolution FOV	11.25°x11.25°		~15°
Gamme en masse (amu)	1-64	1-44	1-132
Résolution en masse (M/ Δ M)	40	~53	<58
Résolution en temps	4s	1s	1 à 32s
Facteur géométrique (cm ² .st)	5x10 ⁻³		1.3x10 ⁻³
Dimensions (cm ³)	30x30x20	25.2x19.4x13.4	12x12x20
Poids (kg)	4.2kg	7kg	1.8kg
Consommation (W)	3W	5W	3.1 à 7W

Tableau 6 : Tableau récapitulatif des caractéristiques des spectromètres d'ions exposés

La comparaison des caractéristiques de ces trois instruments montre que celles-ci dépendent très fortement des objectifs scientifiques. La gamme d'énergie des particules, le champ de vue, la résolution en masse et le temps de balayage donnent à l'instrument une unicité pour la mesure. L'objectif idéal correspond à réaliser une mesure de tous les paramètres sur un champ de vue le plus grand possible pour un cycle de mesure donné.

4.2. Spectromètres de masse neutre :

Les spectromètres de masse neutre diffèrent peu du principe des spectromètres de masse ion, mis à part l'ajout d'une source d'ionisation ou de techniques de détection de neutre. Cet ajout a cependant souvent des conséquences importantes sur le champ de vue de ces instruments, comme illustré par la suite.

4.2.1. STROFIO

L'instrument STROFIO (pour "strofi" qui veut dire faire tourner en grec), sur la mission Bepi-Colombo, est à l'origine de l'un des concepts utilisé par NIMEIS. L'utilisation d'un temps de vol avec un réflectron suivi du concept de déflexion des trajectoires en entrée de l'espace temps de vol provient de cet instrument. STROFIO est composé de deux ouvertures à 180° avec chacune une ouverture angulaire de 20°. Les particules neutres sont ionisées par impact électronique dont les électrons sont produits par un filament chauffé. Les ions sont ensuite dirigés vers l'espace temps de vol après être passés par une optique d'accélération et de focalisation. Le détecteur est composé de galettes à micro canaux (Micro Channel Plate, MCP, section 3.3.1 du chapitre IV) se présentant sous la forme d'un anneau.

Le potentiel défecteur à l'entrée de l'espace temps de vol varie de façon à pouvoir réaliser une rotation des impacts des particules sur le détecteur autour de l'axe des particules à l'entrée du réflectron. La position de l'impact sur le détecteur donne le temps "start", le temps "stop" étant donné par l'impact sur le détecteur. Le principe de fonctionnement de l'instrument STROFIO est illustré sur la Figure III-16.

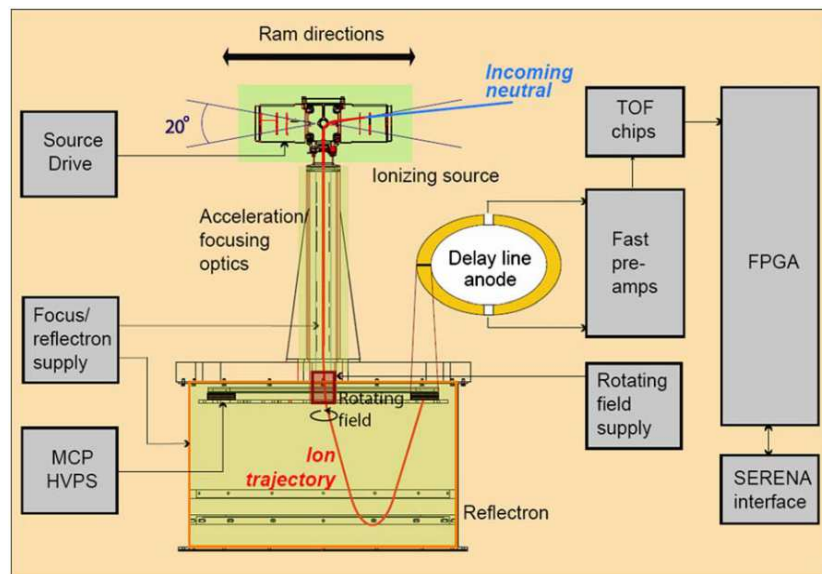


Figure III-16 : Block diagram de STROFIO (S.Orsini 2010)

4.2.2. ELENA

L'instrument ELENA (Emitted Low-Energy Neutral Atoms) sur la mission Bepi-Colombo est un spectromètre de masse à temps de vol constitué d'une grande ouverture angulaire dans l'un des plans et petite dans l'autre plan (S. Orsini et al. 2010). Son principe repose sur le fait de mesurer directement les neutres sans les ioniser. L'avantage de cette mesure réside dans le fait de pouvoir mesurer des flux de basse énergie avec une bonne résolution angulaire (pas de modification de trajectoire après l'ionisation). ELENA est le premier instrument à mesurer un flux de particules neutre de manière directe à basse énergie. A l'entrée de l'espace temps de vol se trouve une double membrane en nitrure de silicium (Si_3N_4), composée de fentes à l'échelle nanométrique. Une membrane est fixe, la seconde oscille avec une fréquence variant de 20kHz à 100kHz réalisant l'alignement des deux membranes. Lorsque l'alignement se produit, les particules neutres entrent dans l'espace temps de vol, le temps "start" est donné, l'impact sur des MCP donne le temps "stop". La Figure III-17 illustre le concept de l'instrument.

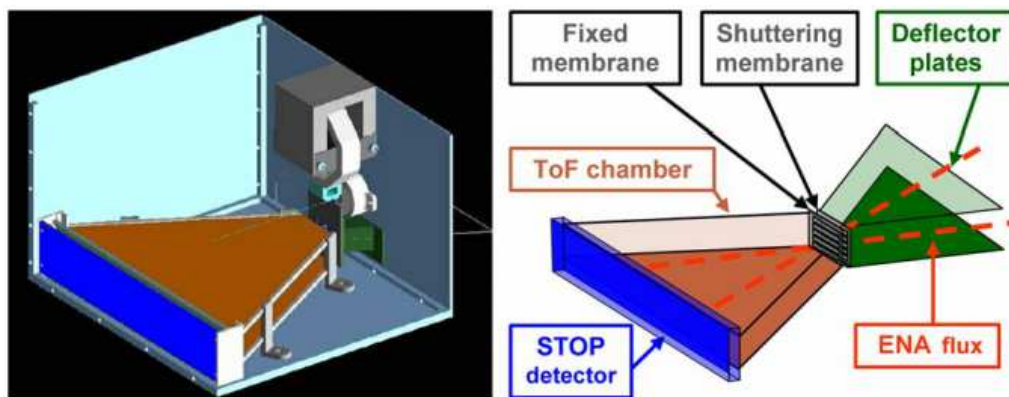


Figure III-17 : Concept d'ELENA. (S.Orsini 2010)

4.2.3. ROSINA

L'instrument ROSINA (Rosetta Orbiter Spectrometer for Ion and Neutral Analysis), sur la mission ROSETTA, est un spectromètre de masse neutre pouvant mesurer des masses de 1 uma jusqu'à >300 uma avec une haute résolution en masse >3000. Celui-ci est capable de séparer le CO du N₂ ou encore ¹³C de ¹²CH (Balsiger et al. 2007).

ROSINA se compose de trois instruments, dont deux spectromètres de masses :

- DFMS (double focusing magnetic mass spectrometer) est un spectromètre de masse neutre constitué d'une source d'ionisation à filament et d'une analyse en masse et d'un analyseur en masse recourant à la double déflexion électrostatique et magnétique permettant d'obtenir une haute résolution en masse >3000, et capable d'analyser des masses allant de 1 uma à 150 uma (Mattauch and Herzog, 1934). Une représentation de l'instrument est donnée Figure III-18.

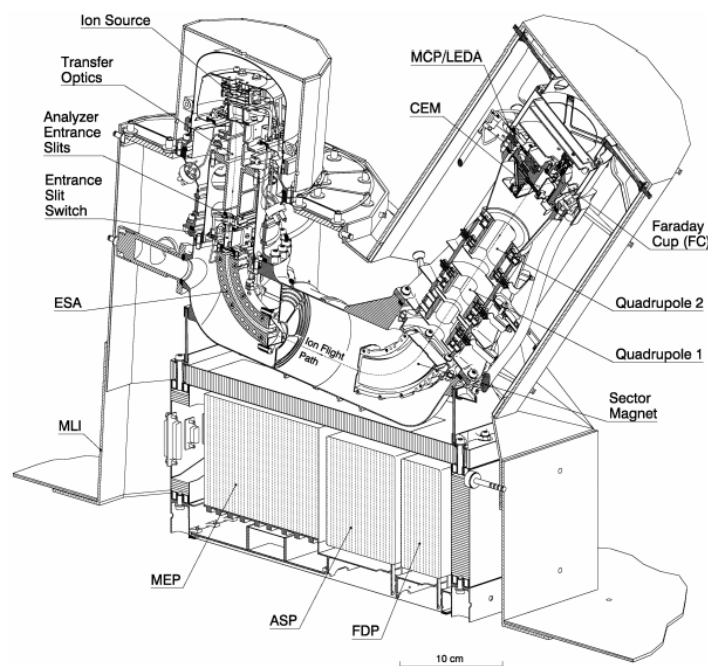


Figure III-18 : Vue en coupe de l'instrument DFMS de ROSINA (Balsiger et al. 2007).

-RTOF (reflectron type time-of-flight) est un spectromètre de masse de type temps de vol pouvant analyser des masses jusqu'à 300 uma avec une résolution en masse de 500. La source d'ionisation fonctionne par impact électronique à partir d'un filament chauffé. Le temps de vol est composé d'un double réflectron afin d'augmenter le temps de vol et la précision sur la mesure de la masse. Une vue en perspective de l'instrument est donnée sur la *Figure III-19.a*. Le principe de la double utilisation du réflectron est présenté sur la *Figure III-19.b*.

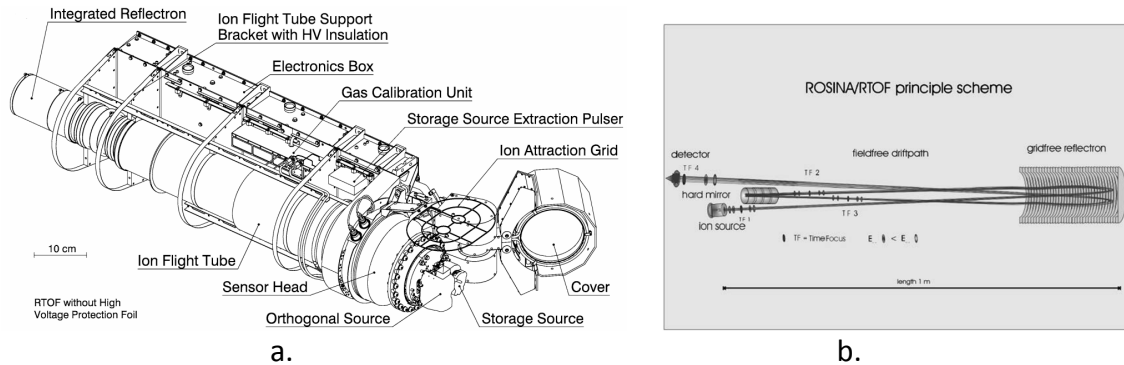


Figure III-19 : a. Plan mécanique de RTOF de ROSINA. b. Concept de temps de vol utilisant un double réflectron (Balsiger et al. 2007).

4.2.4. NGMS

L'instrument NGMS (Neutral Gas Mass Spectrometer), destiné à l'étude de l'exosphère de la lune, est un instrument de type temps de vol composé d'une source d'ionisation composé d'un filament chauffé (Wurz et al. 2012). La partie temps de vol est composée d'un réflectron comme sur RTOF de ROSINA comme le montre la *Figure III-20.b*. Son concept est d'ailleurs un héritage de RTOF de ROSINA. Cet instrument peut être couplé à un chromatographe en phase gazeuse (connexions en jaune sur la partie gauche de la *Figure III-20.a*), mais peut aussi fonctionner seul grâce à une ouverture vers l'exosphère (tube bleu sur la partie droite de la *Figure III-20.a*). La source d'ionisation fonctionne en régime pulsé pour obtenir le temps "start". La fréquence de pulsation peut aller de 1 à 10kHz.

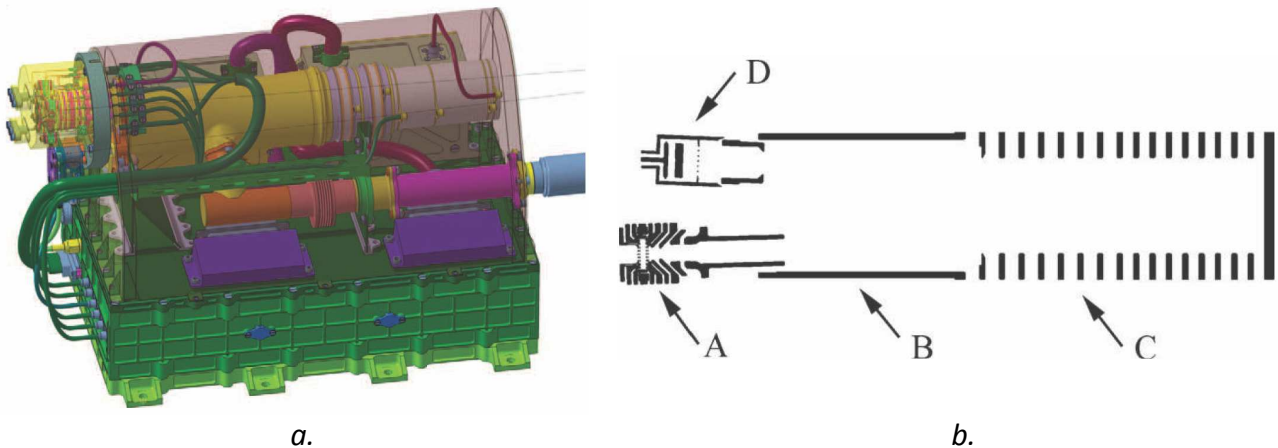


Figure III-20 : a. Représentation de l'instrument NGMS. b. Concept de temps de vol utilisant un réflectron (Wurz et al. 2012).

Le *Tableau 7* suivant regroupe les différentes caractéristiques des instruments neutres décrits précédemment. Nous rajoutons volontairement les caractéristiques de l'instrument NIMEIS pour effectuer une comparaison avec les autres instruments existants. NIMEIS sera décrit par la suite.

	Strofio	DFMS (ROSINA)	TOF (ROSINA)	NGMS	ELENA	NIMEIS
Gamme en énergie	<1eV	<eV	<eV	<eV	<20-5keV	0-100eV
Résolution en énergie	N/A	N/A	N/A	N/A	$\Delta v/v \sim 10\%$	$\Delta E \sim 0.5\text{eV}$
Champ de vue (FOV)	20°x20°	20°x20°	10x40°		2°x76°	15°x15°
Gamme en masse (amu)	1-100	12-150	1-300	<1000	<100	1-100
Résolution en masse (M/ ΔM)	>60	3000	>500	400-1100	distinguer H de C et O	~30
Facteur géométrique	0.14counts.s ⁻¹	10 ⁻⁵ A/mbar	10 ⁻⁴ A/mbar		4x10 ⁻⁴ cm ² sr.eV	TBD
Dimensions (cm ³)	30x15x15	63x63x26	114x24x38	24.5x14.5x17.6		39x20x11
Poids (kg)	2.5kg	16.2kg	14.7kg	3.5kg		4.5kg
Consommation (W)	6.1W	19W	24W	9-17W		7.3W

Tableau 7 : Caractéristiques de différents spectromètres de masse neutre.

4.3. Leçon récente de la sonde ROSETTA

L'instrument ROSINA de la mission ROSETTA a mis en évidence le fait que le satellite dégaze dans l'espace de manière continue et sur des échelles de temps de l'ordre de plusieurs années. La présence à bord de la sonde ROSETTA des instruments ROSINA (section 4.2.3) a permis de caractériser précisément la composition de ce dégazage. L'équipe de ROSINA a notamment démontré que la température et la pression entraînent la libération de molécules volatiles et en particulier de molécules d'eau par les parois externes du satellite (Schläppi et al. 2010). Le satellite conserve alors une atmosphère résiduelle avec des densités allant jusqu'à 10⁷ H₂O cm⁻³, comme le montre la *Figure III-21*. L'importance des densités mesurées même après 6 ans de croisière est surprenante dans cette mesure. La manière dont une telle atmosphère résiduelle peut se maintenir autour du satellite pendant un temps si long reste physiquement inexpiquée.

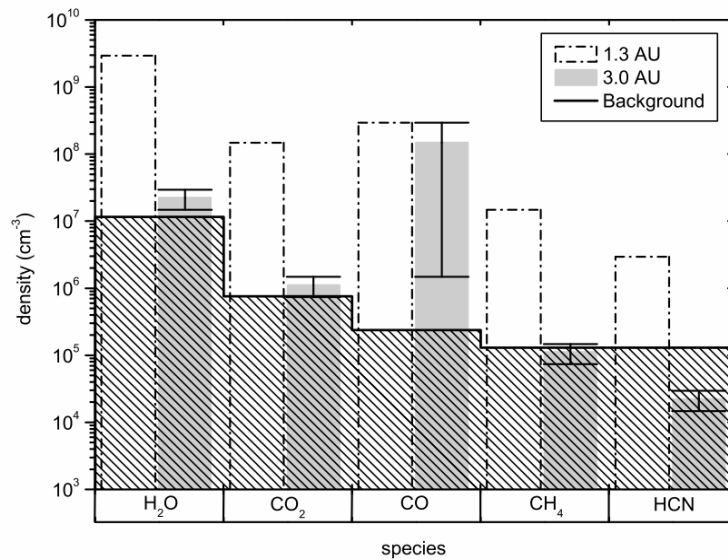


Figure III-21 : Comparaison de l'atmosphère résiduelle du satellite (zones hachurées) avec les densités attendues à 30km de la comète pour l'instrument DFMS de ROSINA sur la sonde ROSETTA (Schläppi et al. 2010). Les barres grises correspondent à la moyenne du CO₂ et H₂O cométaires au début de l'activité de la comète (3 AU).

Cette atmosphère est à la température du satellite. La mise en évidence d'une atmosphère résiduelle montre que les mesures de particules neutres sont fortement polluées par l'atmosphère résiduelle du satellite, notamment quand les densités à mesurer sont faibles. Un instrument capable de mesurer une distribution en énergie (voir section 2.3.4 du chapitre IV), permettra donc de filtrer une partie de cette atmosphère résiduelle. Typiquement, en considérant la vitesse du satellite, de l'ordre de quelques km/s (correspond à une énergie ~ 1.3 eV, pour un atome d'oxygène entrant dans l'instrument à une vitesse de 4 km.s^{-1}), nous avons estimé qu'une résolution en énergie de l'ordre de 0.5 eV devrait permettre de réduire d'un facteur 10 à 1000 les densités de l'atmosphère résiduelle du satellite par rapport aux densités de l'atmosphère locale (voir section 2.5.2 du chapitre IV).

Résumé du Chapitre III

Afin d'étudier les exosphères planétaires, un instrument doit mesurer, des énergies faibles allant de quelques dixièmes d'eV à quelques dizaines d'eV avec une résolution inférieure à 1eV, des masses allant au-delà de 30 avec une résolution de ~ 30 , une sensibilité capable de mesurer des densités $< 10^8$ particules.cm⁻³ et une résolution spatiale et temporelle capable de dissocier variation spatiale et temporelle.

La spectrométrie de masse est a priori la seule méthode d'analyse adaptée à ces objectifs, et en particulier la technique de mesure par temps de vol. La méthode de calcul pour reconstituer la fonction de distribution à partir de la mesure réalisée par le spectromètre de masse a été également détaillée.

Une revue des différentes techniques disponibles et des solutions spatialisées qui ont été proposées ces dernières dizaines d'années pour réaliser une mesure en masse et en énergie suggère que la meilleure approche dans le cas de milieux très peu denses est la spectrométrie par temps de vol.

IV. Analyse des neutres thermiques et suprathermiques : le spectromètre NIMEIS

1. Objectifs Instrumentaux

Comme explicité dans le chapitre II, l'environnement à étudier est pauvre en particules avec une densité typique inférieure à 10^8 particules par cm^3 ². A partir de ce constat, notre instrument doit pouvoir disposer d'une source d'ionisation optimisée de manière à ioniser un maximum de particules neutres. Cette partie de NIMEIS est décrite dans la partie 4 de ce chapitre. Expliquée précédemment dans les objectifs scientifiques (chapitre II), la mesure de l'énergie des particules est importante sur une gamme d'énergie de l'ordre de 0eV à une dizaine d'eV. Cette mesure doit être faite instantanément sur un intervalle en énergie de l'ordre de 10eV afin d'éviter au maximum tout cycle de mesure qui réduirait d'autant la sensibilité de notre instrument. De la même manière, cet instrument doit pouvoir réaliser une analyse en masse instantanément. L'instrument est donc composé d'une source d'ionisation basée sur l'utilisation de cathodes froides, d'un analyseur en énergie et d'un analyseur en masse (réflectron). Un bref aperçu des différents éléments est donné ci-après.

1.1. Source d'ionisation à très haut rendement

Les sources d'ionisation sont indispensables à l'étude des environnements neutres par spectrométrie de masse. Cependant, les efficacités optimales des sources d'ionisation embarquées atteignent des courants de l'ordre de 10^{-5} A/Torr pour des puissances consommées de quelques W (Balsiger et al. 1998), efficacité qui rend très difficile l'exploration des régions faiblement denses. Les instruments comme STROFIO, RTOF de ROSINA ou encore NGMS utilisent des filaments chauffés qui vont émettre des électrons thermiquement (voir section 4.1.1 du chapitre IV). La densité ainsi que l'énergie moyenne des électrons sont optimisées dans le but d'augmenter la probabilité d'ionisation des particules neutres. Le principal défaut de ces cathodes réside dans le fait de consommer beaucoup de courant pour pouvoir émettre des électrons. La seconde problématique va être le chauffage de l'environnement du filament qui peut inclure le dégazage d'une population neutre au risque de polluer la mesure. La source d'ionisation est décrite dans la section 4 du chapitre IV. Pour palier à ces limitations, un concept de cathode froide a été étudié, se basant sur l'utilisation de nano tubes de carbone.

² Afin de relier la densité à la pression, nous prenons l'exemple de ROSINA, où une densité de particules de H_2O de 10^8cm^{-3} à une température de 150K correspond à une pression de $\sim 10^{-9}$ mbar.

1.2.Principe de mesure instantanée de l'énergie et de la masse

La partie analyse de l'instrument était originellement composée de deux optiques. Un analyseur en énergie séparant les énergies sur une gamme de 10eV avec une résolution de 0.5eV, et un réflectron permettant d'obtenir la masse des particules. Ce modèle a été proposé par F.Cipriani durant sa thèse en 2006, à l'origine de NIMEIS. La *Figure IV-1* suivante montre le principe de fonctionnement de cet instrument. L'analyseur en énergie se trouve à la sortie de la source d'ionisation, réalisant une séparation en énergie dans le plan perpendiculaire à l'axe X. L'obtention d'une dispersion en énergie nous permet ensuite de réaliser une étude du temps de vol simultanément sur toute la distribution énergétique. Dans ce but, un réflectron est placé en sortie de l'analyseur en énergie. Pour les instruments utilisant un réflectron comme RTOF sur ROSINA (voir section 4.2.3 du chapitre III) ou PALOMA (voir section 3.2.1 du chapitre IV), le faisceau de particules est circulaire avec un réflectron à symétrie cylindrique, ce qui permet d'augmenter les propriétés de temps de vol de l'instrument en plaçant des électrodes proches du faisceau de particules. Pour NIMEIS, ce n'est pas applicable puisque le réflectron doit réfléchir toute la distribution en énergie, la géométrie du réflectron étant alors de forme rectangulaire.

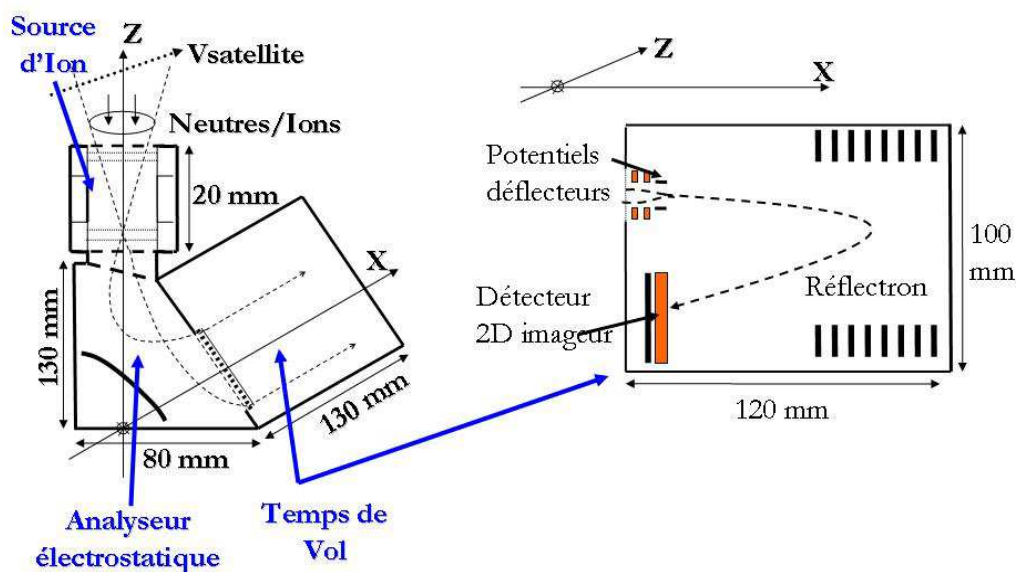


Figure IV-1 : Principe de fonctionnement de l'instrument NIMEIS. Lorsque les particules neutres sont ionisées, celles-ci entrent dans l'analyseur en énergie dans le but d'être séparées en fonction de leur énergie. Les particules dispersées en énergie entrent ensuite dans un réflectron qui fonctionne dans un plan perpendiculaire à celui de l'analyseur. Le temps d'arrivée des particules sur le détecteur nous permet, par l'utilisation d'un déflecteur (section 2.3.3 du chapitre IV), de connaître le temps de vol des particules.

Pour déterminer la masse il faut une mesure du temps de vol qui donne accès à la vitesse de la particule dès que l'on connaît l'énergie. Avoir le temps de vol signifie qu'on mesure le temps d'entrée de l'ion dans l'analyseur (temps "start") et le temps d'impact sur le détecteur (temps "stop"). Ce dernier est fourni par l'impulsion délivrée par le détecteur, reste donc à déterminer le temps "start". Il y a 2 techniques classiques :

- le gating qui ouvre l'accès aux ions pendant un temps très court entre T_0 et $T_0 + \Delta T$ où $\Delta T \ll \text{temps de vol des ions}$, le temps "start" étant donc défini par $T_0 + \Delta T/2$ avec une incertitude $\pm \Delta T/2$.

- l'obtention d'un signal électrique au moment où l'ion entre dans l'instrument. Ce signal est obtenu généralement en interposant une feuille de carbone très mince sur le trajet de l'ion à l'entrée de l'instrument : l'ion éjecte un électron secondaire dont la détection par un détecteur adéquat fournit le temps "start". Le gating a pour inconvénient principal son temps mort puisque la fraction effective du temps de fonctionnement de l'instrument est de $\Delta T / \text{Temps de Vol}$ soit $\sim 1\%$ lorsqu'on ne cherche pas de résolution en masse très forte. Vu les faibles flux attendus pour NIMEIS, ceci est inacceptable. La technique « feuille de carbone » supprime le temps mort puisque les ions entrent en permanence et que chacun d'eux est détecté individuellement. C'est pourquoi cette technique est très largement utilisée pour la mesure des plasmas suprathermiques spatiaux dans la gamme de quelques eV à quelques dizaines de keV. Elle a cependant deux inconvénients, la nécessité d'accélérer les ions pour qu'ils atteignent une énergie suffisante pour traverser la feuille de carbone (au minimum 10 keV avec les feuilles de carbone produites actuellement) et, surtout, la diffusion des ions par la feuille de carbone et les échanges de charge qu'ils subissent ce qui rend impossible, dans l'optique de NIMEIS, d'obtenir l'information sur l'énergie en mesurant la position de l'impact de l'ion sur le détecteur. Nous avons donc été amenés à choisir une 3ème technique pour l'obtention du temps "start". Elle consiste à défléchir l'ion à l'entrée de l'instrument en utilisant un déflecteur électrostatique auquel est appliquée un potentiel variable VD, en général sous la forme d'une dent de scie, et qui défléchit les ions dans la direction de l'axe Z. Avec un déflecteur de très petite longueur le long de la trajectoire de l'ion, on peut supposer que l'intervalle de temps pendant lequel l'ion traverse le déflecteur δT est très petit et que VD est $\sim$ constant pendant la traversée et égal à VD(temps "start"). L'ion, défléchi dans la direction de l'axe Z, va impacter le détecteur à une position Zf qui dépend de VD(temps "start"). La mesure de Zf fournit alors temps "start". L'avantage de cette technique est qu'elle n'est pas intrusive, comme celle des feuilles de carbone et qu'elle n'a pas non plus de temps mort. Le prix à payer est la réalisation d'un circuit générant des tensions de déflexion VD assez importantes avec des périodes de dent de scie de l'ordre de la μs contraintes par le temps de vol des ions dans l'instrument ce qui demande une puissance significative ainsi que la nécessité d'avoir une dynamique importante pour la mesure des temps de vol ce qui conduit à une complexité supplémentaire pour l'instrument qui est décrite dans la suite.

2. Optique du spectromètre : étude et modélisation

2.1. Outils : logiciel d'optique électrostatique et algorithme génétique.

2.1.1. Logiciel d'optique électrostatique : SIMION®

SIMION® est un solveur de l'équation de Laplace qui permet de calculer le potentiel électrostatique et le champ électrique en tout point de l'espace pour un ensemble de valeurs de potentiels appliqués aux électrodes du modèle. La méthode de résolution se fait par méthode des différences finies (Dahl, 2000). SIMION® permet d'ailleurs de tracer les trajectoires de particules chargées se déplaçant dans le modèle. Tous les modèles numériques étudiés dans ce manuscrit ont été réalisés via le logiciel SIMION®. La carte de potentiel est composée d'un maillage dont la taille est à définir en fonction du modèle. Il est possible de réaliser des modèles en 3D qui

demandent beaucoup de mémoire vive en fonction de la taille de la maille et de la taille du volume à décrire. La dernière version du logiciel, SIMION[®] 8.1, permet de réaliser des modèles avec un nombre illimité de points, la limite est donnée par la mémoire vive de l'ordinateur. Le PC mis à disposition pour les optimisations, possédant une mémoire vive de 24Go, permet de réaliser des modèles comportant plus de $2 \cdot 10^9$ points pour définir le maillage. Dans le cadre du développement de l'instrument NIMEIS, un tel maillage n'est pas nécessaire car les géométries sont ne sont pas complexes. Par contre, comme nous le verrons pour la suite (chapitre V), l'instrument PICAM nécessite un tel maillage pour définir l'instrument en 3D avec une résolution suffisante.

2.1.2. Algorithme génétique

Lors de l'optimisation de modèles numériques, la recherche des meilleures solutions est effectuée par des programmes d'optimisation. Plusieurs méthodes d'optimisation sont possibles, comme les techniques heuristiques d'optimisation, d'optimisation de recuit simulé ou encore d'optimisation génétique. Les techniques d'optimisation heuristiques regroupent plusieurs catégories d'optimisation comme l'algorithme glouton qui recouvre tout l'espace de solutions sans modifier ses paramètres d'optimisation ou encore la méthode aléatoire pure qui s'arrêtera au premier optimum local rencontré. La méthode de recuit simulé recouvre plusieurs optima locaux et réduit le pas de variation lorsque l'on s'approche d'un optimum. La méthode de recuit simulé ainsi que les algorithmes génétiques évitent à l'optimisation de tomber dans des optimums locaux comme les méthodes classiques heuristiques. Le choix adopté pour notre optimisation est l'utilisation d'un algorithme génétique.

Ceux-ci permettent de donner une solution approchée d'un problème d'optimisation dont la solution est inconnue. Idéaux pour leur temps de résolution raisonnable, ces algorithmes sont basés sur le principe de sélection naturelle. Une population aléatoire est définie et évolue, itération après itération, en ne conservant que "les plus forts" selon le concept de Darwin, pour donner un résultat attendu (Sastry et al. 2005).

Il existe toute une famille d'algorithmes génétique dont le plus adapté est celui de Baker (1985) que nous allons utiliser ici. Les algorithmes génétiques de Baker (1985) utilisent une population de départ stochastique. Effectivement, dans notre cas nous prenons, pour valeurs initiales des paramètres à optimiser, une distribution aléatoire dans des intervalles de valeurs raisonnables.

Une population est définie à partir d'un nombre X de paramètres que nous appelons gènes. Chaque paramètre a son domaine de valeurs possibles, définies par le programmeur.

Un individu de la population correspond à un résultat donné par le jeu de paramètres X dont les variables sont définies aléatoirement sur le domaine de chaque paramètre. Ce procédé est répété N fois afin d'obtenir une population de N individus. Les résultats sont ensuite triés en fonction des critères de sélection définis par le programmeur. Un quart de la population de l'itération suivante est formée à partir des meilleurs éléments. Un autre quart est constitué d'une mutation génétique des meilleurs éléments en réalisant des croisements de gènes entre eux. Le reste de la population est générée par des individus dont les gènes sont choisis aléatoirement.

2.2. Modèle originel

Afin de pouvoir caractériser les particules exosphériques de basse énergie, l'instrument doit ioniser les particules neutres. L'instrument est donc formé de deux parties, une partie ionisation et une partie analyse. Dans cette section, nous nous intéressons uniquement à la partie analyse. NIMEIS doit être capable de former une image 2D, énergie et masse des particules neutres qui entrent dans l'instrument. A partir de cet objectif et des solutions d'optiques existantes, la première solution a été de séparer les deux dimensions de l'analyse :

- un analyseur en énergie qui sépare les énergies et les focalisent.
- un temps de vol composé d'un réflectron en sortie de l'analyseur en énergie va nous permettre de connaître la masse des particules par l'intermédiaire du temps de vol des particules entre deux points (voir section 3.5 du chapitre III).

En spectrométrie de masse classique, certains dispositifs comme les « double focusing mass spectrometers », permettent de calculer analytiquement les aberrations au 1^{er} et 2^{eme} ordre (dus à la dispersion en énergie et en angle du faisceau d'ions à l'entrée du spectromètre) qui affectent la position des impacts des ions d'une masse donnée sur le plan où on place le détecteur. On peut alors déterminer les caractéristiques géométriques des analyseurs électrique et magnétique et la position du plan de détection qui permettent d'annuler tout ou partie de ces aberrations. Ce plan est alors appelé « plan focal ». Dans notre cas, en raison de la complexité des éléments de l'optique, les calculs analytiques sont impossibles et nous définissons le plan focal comme le plan où la dispersion des points d'impacts des ions d'une espèce et d'une énergie donnée est minimum, autrement dit où la « tâche » correspondant aux impacts des ions a une dimension minimale. La position de ce plan et les caractéristiques optimales de l'optique (géométries et polarisation des électrodes) sont obtenues par une méthode numérique d'optimisation globale.

La *Figure IV-2* suivante donne une représentation de l'instrument NIMEIS composé des deux parties et d'une optique d'interface.

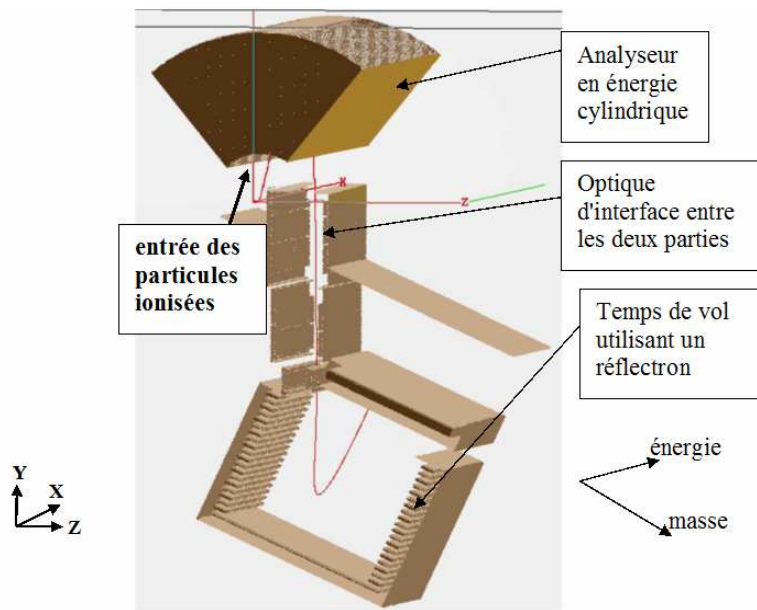


Figure IV-2 : concept originel de NIMEIS. Sur cette figure sont représentés les deux principaux composants de NIMEIS. Un analyseur électrostatique (portion de cylindre en haut de la figure) disperse en énergie les particules suivant l'axe x et focalise le faisceau à l'entrée de l'analyseur au niveau de l'optique placée entre l'analyseur et l'électrostatique de mesure de temps de vol en bas de la figure. Le principe de l'analyseur en énergie est celui d'un analyseur cylindrique. La principale difficulté de celui-ci est la focalisation en sortie et donc l'acceptance angulaire et spatiale à son entrée (sur la gauche de la figure). Le principe de l'électrostatique à temps de vol est celui d'un réflectron.

L'analyseur en énergie se place en sortie de la source d'ionisation. La gamme en énergie des particules à analyser est de 0 à 10eV avec une résolution $<1\text{eV}$. Il est possible d'accélérer les particules dans l'instrument pour faciliter la focalisation mais il faut veiller à ne pas dégrader la résolution en énergie. Il s'avère que ces deux paramètres sont très dépendants, l'augmentation de l'énergie moyenne augmentant la difficulté à bien séparer les énergies. Dans la suite de notre étude, les énergies utilisées dans les modèles sont arbitraires sachant que l'accélération peut se faire en amont.

La façon la plus abordable afin d'optimiser un tel instrument consiste à traiter chaque partie séparément. La première partie traitera de l'optimisation de l'analyseur en énergie et sera suivie d'une partie discutant le réflectron.

2.2.1. Analyseur en énergie.

Dans le paragraphe 3.6 du chapitre III, nous avons brièvement décrit l'optique d'un analyseur électrostatique qui permet de réaliser une sélection en énergie avec une bande passante définie correspondant à la résolution en énergie recherchée. Pour couvrir une gamme en énergie plus vaste, le potentiel de l'analyseur varie à chaque mesure et permet ainsi de couvrir tout le domaine en énergie souhaité.

Dans notre cas, la densité du milieu étant faible, il est plus efficace de faire une mesure sur une gamme plus grande en énergie avec une résolution définie afin de limiter tout cycle de mesure, synonyme de perte de sensibilité.

Ce concept d'analyseur s'inspire directement de l'instrument NMS embarqué sur la sonde cométaire GIOTTO et développé au CETP. Une coupe médiane de l'analyseur en énergie est représentée sur la Figure IV-3.

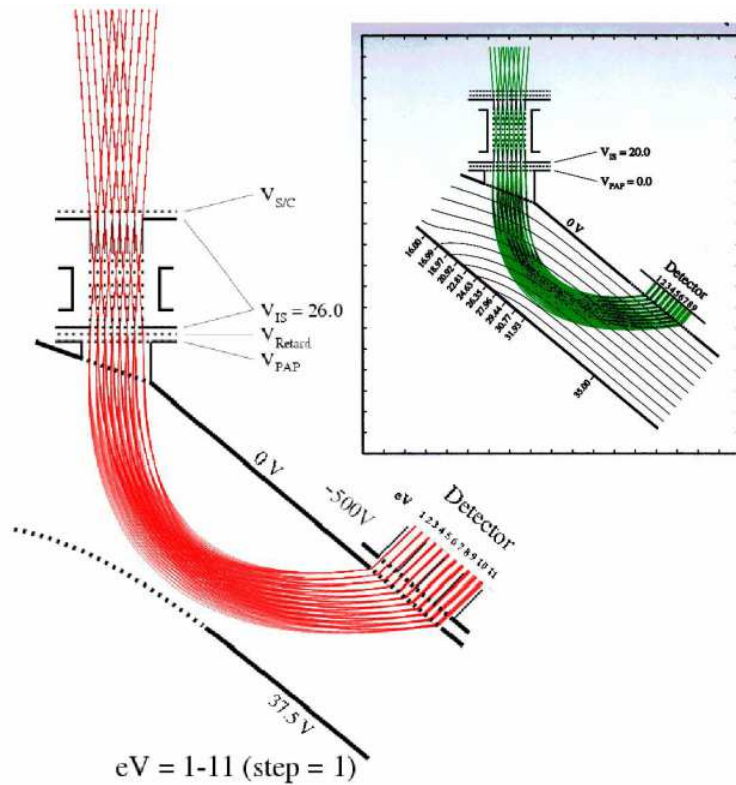


Figure IV-3 : Simulation des trajectoires de l'oxygène suprathermique pénétrant dans la source avec un angle de 4° (Hodges, communication privée). L'analyseur disperse les ions sur le plan de sortie en fonction de leur énergie. Les ions sont ensuite accélérés vers le détecteur par l'application d'une 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 11eV. (extrait de la thèse F.Cipriani 2006)

Comme on peut le voir sur la Figure IV-3, l'analyseur fournit sur le détecteur une image instantanée du spectre en énergie des ions. 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, représentée sur la figure placée en encart dans la figure supérieure droite (tracé de particules vert), est placée face à la sortie de la source et du détecteur. Les potentiels de ces électrodes ont ensuite été optimisé, de façon à obtenir la focalisation souhaitée. Dans un second temps, à partir du tracé des équipotentiels du système obtenu, une forme d'électrode matérialisant l'une des équipotentiels a été introduite (l'électrode portée à 37.5 V sur la Figure IV-3) de façon à minimiser le nombre total de potentiels à alimenter.

Le calcul des trajectoires effectué par R.R. Hodges, 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. Partant de ce modèle, une nouvelle optimisation est réalisée afin d'augmenter les propriétés d'entrée du faisceau dans l'analyseur. L'utilisation d'un modèle cylindrique dont l'axe de rotation se trouve sur la fente d'entrée et de sortie permet la focalisation des particules en azimut, augmentant ainsi le champ de vue en sortie de la source d'ionisation comme le montre la *Figure IV-4* qui représente le type d'ouverture possible en entrée de l'analyseur en énergie.

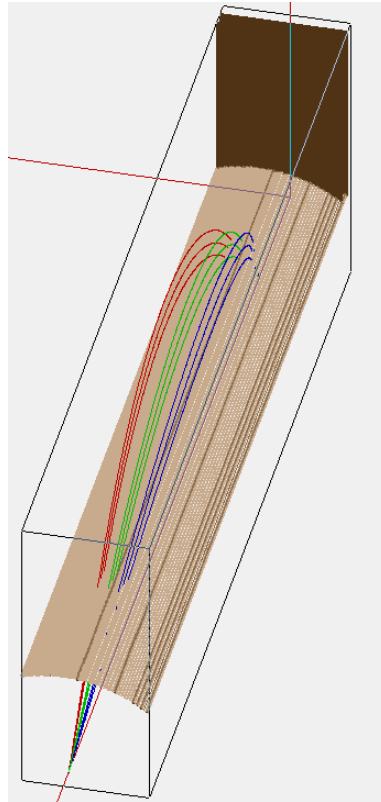


Figure IV-4 : Vue en 3D de l'analyseur en énergie sur lequel on constate une focalisation en sortie de l'analyseur (bas de l'image). Cette simulation montre une ouverture de $\pm 5^\circ$ en sortie de la source d'ionisation.

L'analyseur est simplement composé d'une boîte rectangulaire dans le plan de rotation, sous forme de grilles (le faisceau pénètre dans l'analyseur sans interactions avec les bords). Une série d'électrodes se trouve sur les trois faces supérieures du rectangle. Le faisceau d'ions pénètre dans l'analyseur par le coin inférieur gauche (*Figure IV-5*) et sort sur la partie droite basse de l'analyseur tout en séparant les énergies avec une résolution définie. L'optimisation se fera sur les potentiels des électrodes de l'analyseur de manière à obtenir une séparation et focalisation des énergies sur le plan de sortie de l'analyseur. Pour le cas d'une source d'entrée ponctuelle avec une ouverture angulaire, la focalisation et la séparation des énergies se fait simplement. La *Figure IV-5* montre la focalisation des énergies sur le plan de sortie. Dans ce cas là, le plan de sortie ne correspond pas avec l'axe de rotation de l'analyseur.

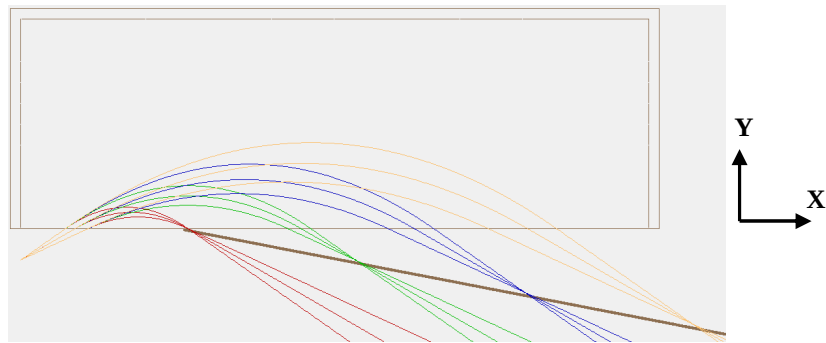


Figure IV-5 : modèle de l'analyseur en énergie pour 4 énergies. Ouverture angulaire de $\pm 5^\circ$ et des énergies allant de 5eV à 20eV par pas de 5eV.

La Figure IV-6 montre le résultat d'une simulation où les particules sont injectées dans l'analyseur en énergie depuis une fente d'entrée et où la dispersion en énergie n'est plus obtenue sur le plan de sortie de l'analyseur.

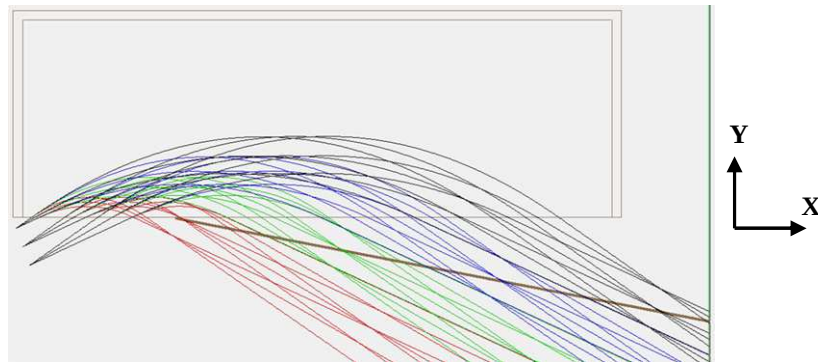


Figure IV-6 : Fente de 4mm. Ouverture angulaire de $\pm 5^\circ$ et des énergies allant de 5eV à 20eV par pas de 5eV.

Cette première étude révèle un problème de focalisation des énergies sur un plan de sortie lorsque les ions entrent dans l'instrument à travers une fente d'entrée de largeur finie et avec des directions de vitesse comprises dans le champ de vue de l'instrument. L'optimisation du modèle par la variation aléatoire des potentiels du modèle ne permet pas de tendre vers des solutions satisfaisantes. Des modifications de la géométrie sont adoptées pour améliorer les résultats. Nous ne rentrons pas ici dans le détail car la phase de recherche d'optimum est longue et inintéressante. Il a été mentionné précédemment que l'entrée et la sortie devaient se faire sur l'axe de rotation pour faciliter les interfaces entre les optiques (source d'ionisation/analyseur en énergie et analyseur en énergie/rélectron). Non seulement l'entrée et la sortie doivent se faire sur l'axe de rotation mais il faut aussi que les trajectoires soient centrées sur la perpendiculaire à l'axe de rotation. En effet, ces deux conditions sont nécessaires pour faciliter au mieux l'interface entre les optiques. La phase finale d'optimisation prend en compte les deux critères d'optimisation, à savoir la séparation et focalisation des énergies sur le plan de sortie ainsi qu'une entrée et sortie sur l'axe de rotation de l'analyseur avec des trajectoires perpendiculaires à l'axe de rotation. La Figure IV-7 suivante donne l'un des résultats de l'optimisation où la géométrie de l'analyseur a quelque peu évolué. L'entrée se fait sur l'axe de rotation avec une fente de 2mm, une ouverture de 4° et des énergies de 4 à 10eV par écarts de 2eV.

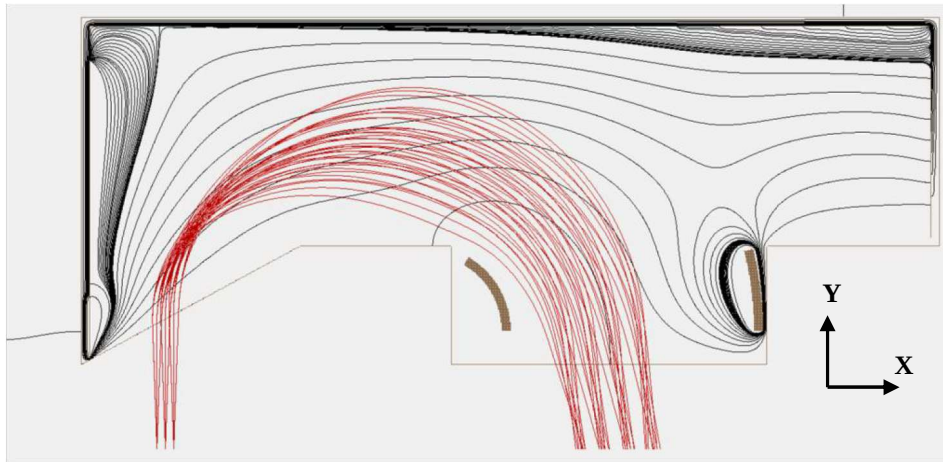


Figure IV-7 : Modèle de l'analyseur en énergie optimisé pour NIMEIS. En noir sont représentées les équipotentiels obtenues à partir d'un résultat d'optimisation où les potentiels sont appliqués sur les électrodes (en marron), contrôlées par 7 paramètres. En rouge sont représentées les trajectoires de particules injectées à gauche de la figure avec une dispersion angulaire de $\pm 2^\circ$ sur une fente de 2mm de largeur. Ces trajectoires ressortent de la figure à droite en ayant été focalisées en énergie (gamme d'énergie de 10eV) par paquets de 2eV.

La résolution en énergie atteinte est de l'ordre de 1eV sur cette gamme d'énergie.

Un modèle d'analyseur a été obtenu en prenant en compte les différentes contraintes. L'entrée se fait sur une fente de 2mm avec une ouverture angulaire de 4° et plus de 20° dans le plan de rotation de l'analyseur (azimut). Une optique d'interface est ensuite nécessaire pour corriger les aberrations de focalisations et donner une bonne mesure sur le temps de vol.

2.2.2. Optique de temps de vol.

L'une des techniques couramment utilisée en spectrométrie de masse à haute résolution est celle du réflectron qui combine deux espaces de dérive, souvent de grande longueur (quelques dizaines de cm) pour obtenir des Temps de vol suffisamment grands, encadrant un espace d'analyse dans lequel un champ électrique réflecteur constant réfléchit les ions en annulant ou minimisant l'aberration due à la distribution en énergie des ions injectés. A la sortie de la source d'ionisation le faisceau est pratiquement parallèle de telle sorte que le pourcentage d'ions perdus dans les espaces de dérive reste faible. Dans le cas de NIMEIS l'ouverture angulaire du faisceau d'ions à la sortie de la source est grande et la taille de l'instrument doit rester très faible ce qui ne permet pas d'appliquer ce concept. Dans de telles conditions l'injection des ions directement dans un champ retardateur variant linéairement et la suppression des espaces de dérive (le champ électrique s'étend depuis l'entrée des ions dans le réflectron jusqu'au détecteur qui fait office de frontière), représentent la meilleure solution puisque dans un champ parfaitement linéaire on peut montrer que le Temps de Vol ne dépend ni de l'énergie ni de l'angle à l'entrée. Cette configuration a été adoptée pour plusieurs spectromètres à plasma lancés ou en développement au cours des dernières années (McComas and Nordholt 1990, Nordholt et al. 1998, Delcourt et al., 2009). Un travail récent sur le même sujet a été également effectué par

Pierre Devoto (2006). Le même principe de champ électrique linéaire a été utilisé pour PALOMA (Chassefière, proposition PALOMA-MACE, 2008).

Dans le cadre de notre étude et l'optimisation du temps de vol, nous nous sommes basés sur le principe de fonctionnement de l'instrument PALOMA (R&T CNES dans le cadre de l'AO Mars Science Laboratory NASA), qui se compose uniquement du réflectron. La *Figure IV-8* suivante montre un résultat de focalisation sur le détecteur en utilisant les paramètres du réflectron de l'instrument PALOMA.

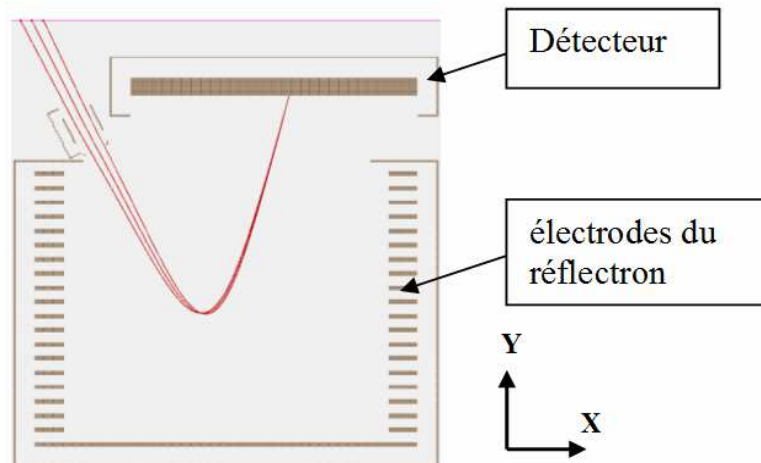


Figure IV-8 : Résultats de focalisation sur le détecteur du réflectron basé sur les propriétés de l'instrument PALOMA. Tir à 5eV avec une ouverture angulaire de $\sim 3^\circ$.

Le réflectron est composé de 21 électrodes. La variation du potentiel est quadratique de manière à produire une variation linéaire du champ électrostatique dans le réflectron, réduisant ainsi les aberrations de temps de vol (Thèse de P. Devoto 2006).

Une découverte a été faite sur le principe de fonctionnement du temps de vol. En effet, l'utilisation d'un réflectron peut fonctionner comme un analyseur en énergie ce qui, après une étude approfondie, permettrait de réduire fortement la taille générale de l'instrument. Ce nouveau fonctionnement réalise une séparation en énergie dans le plan de la masse. Le déflecteur se trouvera alors dans l'autre plan pour réaliser la mesure en masse. La *Figure IV-9* montre le principe de séparation en énergie directement obtenu sur le détecteur dans le plan de la masse originel.

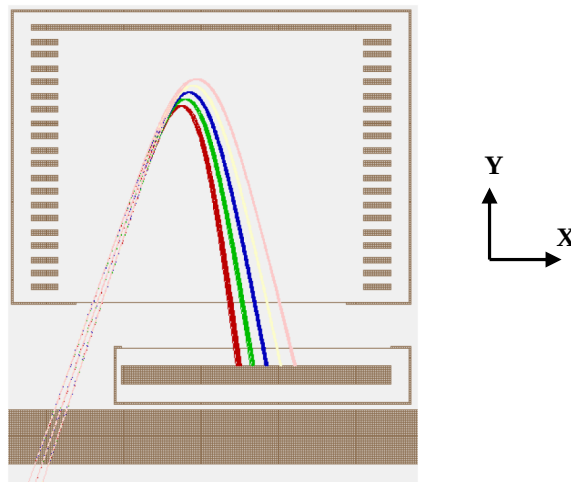


Figure IV-9 : Tir dans le réflectron avec une séparation en énergie de 2eV à 10eV par paquets de 2eV. L'ouverture angulaire est $\sim 1.5^\circ$.

La Figure IV-9 montre que ce changement d'optique est possible. Il ne faut toutefois pas oublier que l'ouverture angulaire est petite. Un travail d'optimisation est nécessaire afin d'augmenter le champ de vue de l'optique tout en faisant attention à ne pas détériorer les propriétés du temps de vol. La méthode d'optimisation choisie ici consiste à partir de la résolution analytique d'une particule en mouvement dans un champ à variation linéaire et d'étudier ses propriétés.

2.3.Evolution de NIMEIS

2.3.1. Réflectron

2.3.1.1. Analyse théorique du réflectron

L'étude théorique du modèle du réflectron peut donner une information sur les limitations théoriques pour le cas d'une séparation en énergie tout en conservant la propriété du temps de vol. Il s'agira d'un modèle plan avec une variation du champ constant selon l'axe X et linéaire selon l'axe Y (potentiel polynomial). La Figure IV-10 illustre la trajectoire d'une particule dans le réflectron.

Dans un premier temps, nous allons déterminer les équations du mouvement pour ce modèle :

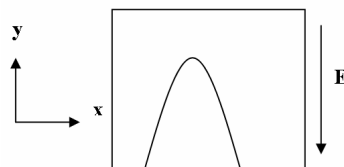


Figure IV-10 : Schéma de représentation du mouvement d'une particule dans un réflectron

Pour définir les équations du mouvement, le vecteur vitesse de la particule est donné dans le repère sphérique :

$$v_x = v_0 \cos \theta \cos \varphi \quad (IV-1)$$

$$v_y = v_0 \sin \theta \cos \varphi \quad (IV-2)$$

$$v_z = v_0 \sin \varphi \quad (IV-3)$$

La troisième coordonnée est nécessaire afin de déterminer les points de focalisation dans les deux plans (énergie selon l'axe Y et masse selon l'axe Z).

Le champ $\vec{E}$ est de la forme $-ay + b$.

La seconde loi de Newton fournit l'équation différentielle :

$$m \times \frac{d^2 \vec{a}}{dy^2} = -q \times (ay + b) \quad (IV-4)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \vec{a}}{dy^2} + \lambda y = \mu \quad \text{où } \lambda = \frac{q \times a}{m} \quad \text{et } \mu = -\frac{b}{m}$$

Avec m la masse de la particule, $\vec{a}$ l'accélération et q la charge.

La résolution de ce type d'équation se fait par l'addition d'une solution générale et d'une solution particulière de la forme :

- solution générale :

$$y(t) = A \times \cos(\sqrt{\lambda} \times t) + B \times \sin(\sqrt{\lambda} \times t) \quad (IV-5)$$

- solution particulière :

$$y(t) = -\frac{\mu}{\lambda} \quad (IV-6)$$

Les conditions initiales permettent ensuite de connaître les constantes :

à $t_0 = 0$, $y = y_0$ et $v_y = v_0 \sin \theta \cos \varphi$

$$y_0 = A - \frac{\mu}{\lambda} \quad (IV-7)$$

$$\Rightarrow A = y_0 + \frac{\mu}{\lambda}$$

et

$$v_0 \sin \theta \cos \varphi = \sqrt{\lambda} \times B \quad (IV-8)$$

$$\Rightarrow B = \frac{v_0 \sin \theta \cos \varphi}{\sqrt{\lambda}}$$

En remplaçant ensuite t par :

$$t = \frac{x - x_0}{v_0 \cos \theta \sin \varphi} \quad (IV-9)$$

et

$$t = \frac{z - z_0}{v_0 \sin \varphi} \quad (IV-10)$$

Les équations de position de y en fonction de x et z sont déterminées :

$$\Rightarrow y(x) = \left(y_0 + \frac{b}{a} \right) \cos \left(\sqrt{\frac{a}{2E}} \frac{x - x_0}{\cos \theta \cos \varphi} \right) + \sin \theta \cos \varphi \sqrt{\frac{2E}{a}} \sin \left(\sqrt{\frac{a}{2E}} \frac{x - x_0}{\cos \theta \cos \varphi} \right) - \frac{b}{a} \quad (IV-11)$$

et

$$\Rightarrow y(z) = \left(y_0 + \frac{b}{a} \right) \cos \left(\sqrt{\frac{a}{2E}} \frac{z - z_0}{\sin \varphi} \right) + \sin \theta \cos \varphi \sqrt{\frac{2E}{a}} \sin \left(\sqrt{\frac{a}{2E}} \frac{z - z_0}{\sin \varphi} \right) - \frac{b}{a} \quad (IV-12)$$

A présent, à partir des équations du mouvement, il est possible de déterminer les positions x_s et z_s qui sont les points de sortie du TOF. Cela revient à résoudre $y = 0$ dans les deux cas :

$$x_s = 2\sqrt{\frac{2E}{a}} \cos \theta \cos \varphi \arctan \left(\frac{\sqrt{2Ea} \sin \theta \cos \varphi}{b} \right) + x_0 \quad (IV-13)$$

et

$$z_s = 2\sqrt{\frac{2E}{a}} \sin \varphi \arctan \left(\frac{\sqrt{2Ea} \sin \theta \cos \varphi}{b} \right) + z_0 \quad (IV-14)$$

Dans notre situation, nous voudrions déterminer le point d'arrivée sur un plan de focalisation situé à une distance h de la sortie du TOF, qui correspond à l'impact sur le détecteur, en ayant une ouverture angulaire à l'entrée. Les paramètres y_{ax} et y_{az} sont définis comme les coordonnées de focalisation lorsqu'il n'y a pas de champ. Dans le plan XY, les particules entrent dans le réflectron avec un angle θ au point x_0 comme le montre la *Figure IV-11*. Le point de coordonnées (x_a, y_{ax}) correspond alors au point de focalisation lorsqu'il n'y a pas de champ dans le réflectron. Dans le plan YZ, les particules entrent perpendiculairement au réflectron avec un angle d'ouverture φ par rapport à la normale. Le point de coordonnées (z_a, y_{az}) correspond au point de focalisation lorsqu'il n'y a pas de champ dans le réflectron comme le montre la *Figure IV-12* :

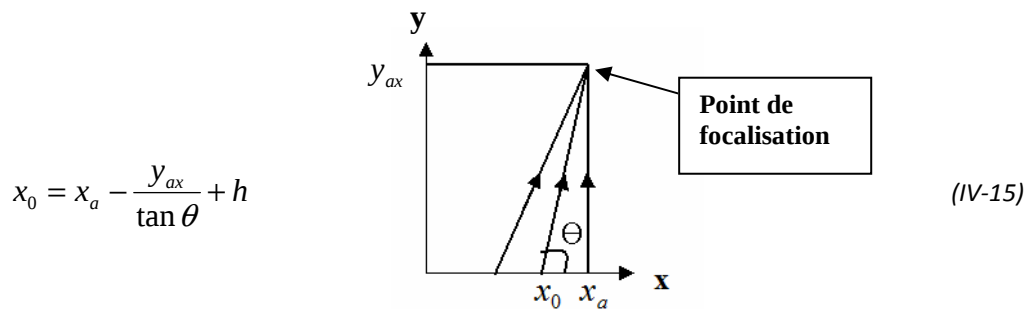
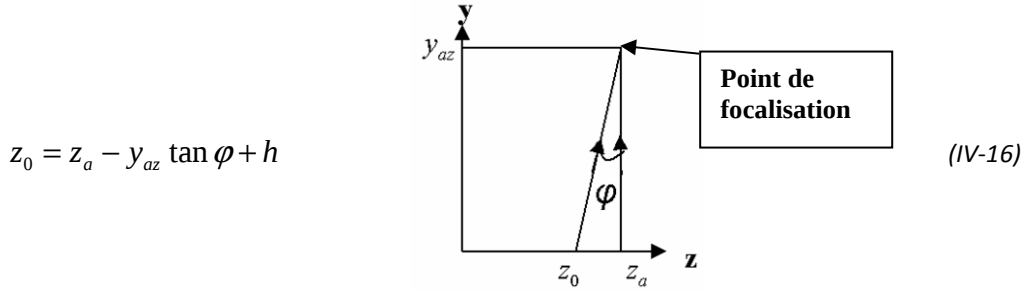


Figure IV-11 : Schéma d'explication de la variable y_{ax}

Figure IV-12 : Schéma d'explication de la variable y_{az}

Nous disposons à présent de deux équations des coordonnées de sortie en fonction de y_a , θ , φ et h . Dans le plan en z , l'angle moyen est de 0° , ce qui revient à prendre $\varphi = 0$. Comme la focalisation se produit sur le plan de sortie à une distance h de la sortie du TOF, la recherche des solutions $\frac{dx_s}{d\theta} = 0$ et $\frac{dz_s}{d\varphi} = 0$ permet de donner les points de focalisation en fonction de θ et h .

Les solutions de ces équations vont ainsi pouvoir donner de nouvelles équations déterminant y_a en fonction de θ et h dans les deux plans.

$$y_{ax}(\theta, h) = \frac{\tan^2 \theta}{(1 + \tan^2 \theta)} \left[2\sqrt{\frac{2E}{a}} \sin \theta \arctan\left(\frac{\sqrt{2Ea} \sin \theta}{b}\right) - \frac{4E \cos^2}{\left(b + \frac{2aE \sin^2}{b}\right)} \right] + h \quad (IV-17)$$

$$y_{az}(\theta, h) = 2\sqrt{\frac{2E}{a}} \arctan\left(\frac{\sqrt{2Ea} \sin \theta}{b}\right) + h \quad (IV-18)$$

Il existe deux paramètres pour chaque fonction. Le paramètre h va jouer comme translation, lorsque h augmente, y_{ax} augmente de façon linéaire. Il est ensuite possible de tracer la variation de y_{ax} et y_{az} pour des valeurs de champ et h fixes en fonction de l'angle d'entrée dans le réflectron θ . L'un des résultats est représenté sur Figure IV-13 où les valeurs de a et b ont été fixées à 0.1 et h à 10mm.

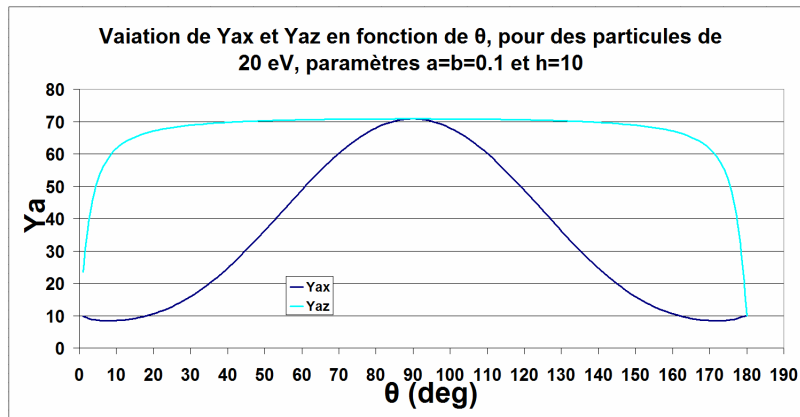


Figure IV-13 : Variation de y_{ax} et y_{az} en fonction de θ pour une valeur fixe de h , déterminés à partir de l'étude analytique.

Le seul point d'intersection entre les deux courbes est à 90° , ce qui n'est pas possible dans notre cas, étant donné le fait que l'entrée correspond alors à la sortie.

En utilisant le logiciel SIMION®, il est possible de réaliser un modèle identique au modèle théorique de manière à corréler la théorie avec la simulation. A l'aide de ce modèle, nous pouvons déterminer à quel angle θ , nous aurons la meilleure focalisation. Il s'avère que plus on s'approche de 90° , plus la focalisation est bonne. Pour cette étude, à $a = b = 0.1$ ont été pris comme paramètres du champ.

La Figure IV-14 montre un tir à 80° , avec une ouverture angulaire de 6° dans les deux plans et une focalisation à une distance h après la sortie du TOF, où les paramètres a et b correspondent à la courbe de variation de y_{ax} et y_{az} , c'est à dire $a = b = 0.1$.

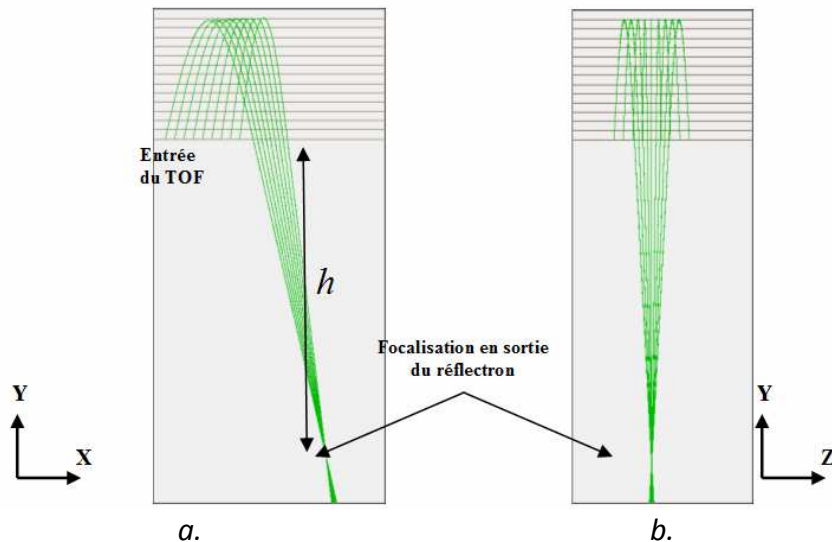


Figure IV-14 : a. Tir à 80° avec une ouverture angulaire de 6° . Visualisation de la focalisation à la sortie à une distance h dans le plan XY. b. Visualisation dans le plan YZ

Pour obtenir la focalisation à la même distance h dans les deux plans, les valeurs des y_{ax} et y_{az} à 80° se trouvant sur la Figure IV-13 ont été prises en compte. La comparaison entre les deux figures montre bien que la focalisation se fait pratiquement à la même distance h .

Nous ignorons comment varie la focalisation en fonction de h , il est possible que ce soit simplement une translation, donc sans dépendance majeure par rapport à h . Idéalement, l'augmentation de h devrait diminuer l'aberration sur l'angle pour une ouverture donnée puisque les y_a seront d'autant plus grands que h sera grand.

En jouant avec les paramètres a et b pour un tir de particules avec une énergie donnée, il n'y a pas d'incidences sur la focalisation. Il y a juste plus de pénétration dans le TOF ou non.

En cherchant les solutions de l'équation $\frac{dx_s}{dS} = 0$ où S représente une fente d'entrée largeur S , nous obtenons une aberration variant en $1/\sin \theta$. Dans ce cas là, il faudrait donc, être le plus proche possible de 90° pour permettre d'avoir une fente au niveau de l'entrée dans le réflectron. L'aberration en temps de vol doit aussi être déterminée. L'équation du temps de vol depuis l'entrée dans le réflectron est donnée par :

$$t = 2\sqrt{\frac{m}{qa}} \arctan\left(\frac{\sqrt{2Ea} \sin \theta \cos \varphi}{b}\right) \quad (\text{IV-19})$$

En cherchant ensuite les solutions de l'équation $\frac{dt}{d\theta} = 0$ et en observant la variation de cette dérivée en fonction des différents paramètres, les conclusions suivantes peuvent être tirées :

- $\frac{dt}{d\theta} = 0$ dans le cas où θ vaut 90° ,
- diminution de la dérivée lors de l'augmentation de l'énergie avec a et b ,
- diminution de la dérivée lors de la diminution des paramètres a et b , avec une énergie fixe.

Jusqu'à présent, le paramètre de l'énergie était fixe. Par la suite, ce paramètre va devenir une variable dans le cas où la fente d'entrée est nulle, c'est à dire $S=0$ et l'ouverture angulaire fixe.

La première étude consistera à observer la variation de la séparation en énergie en fonction de l'angle d'entrée dans le réflectron. Comme nous l'avons dit précédemment, l'aberration sur θ diminue jusqu'à 90° . Sur ces figures, deux tirs ont été réalisés avec une dispersion d'énergie sur 10eV par pas de 2eV avec une énergie moyenne de 95eV. La *Figure IV-15.a* correspond à un tir à 40° , la *Figure IV-15.b* correspond à un tir à 80° . A 40° en entrée, le plan de focalisation de séparation en énergie tend à devenir perpendiculaire aux trajectoires de sortie et une détérioration de la focalisation de chaque énergie est constatée. Concernant le tir à 80° , le plan où la séparation des énergies est la meilleure (que nous appelons plan de focalisation) s'incline par rapport à la direction d'arrivée des particules. La séparation en énergie est alors améliorée, à cause de la diminution de la largeur de la tache sur le plan de focalisation. En gardant à l'esprit les aberrations temporelles ainsi que les conditions de fente d'entrée, nous concluons qu'il nous faut choisir un angle d'entrée se rapprochant des 90° d'angle pour θ .

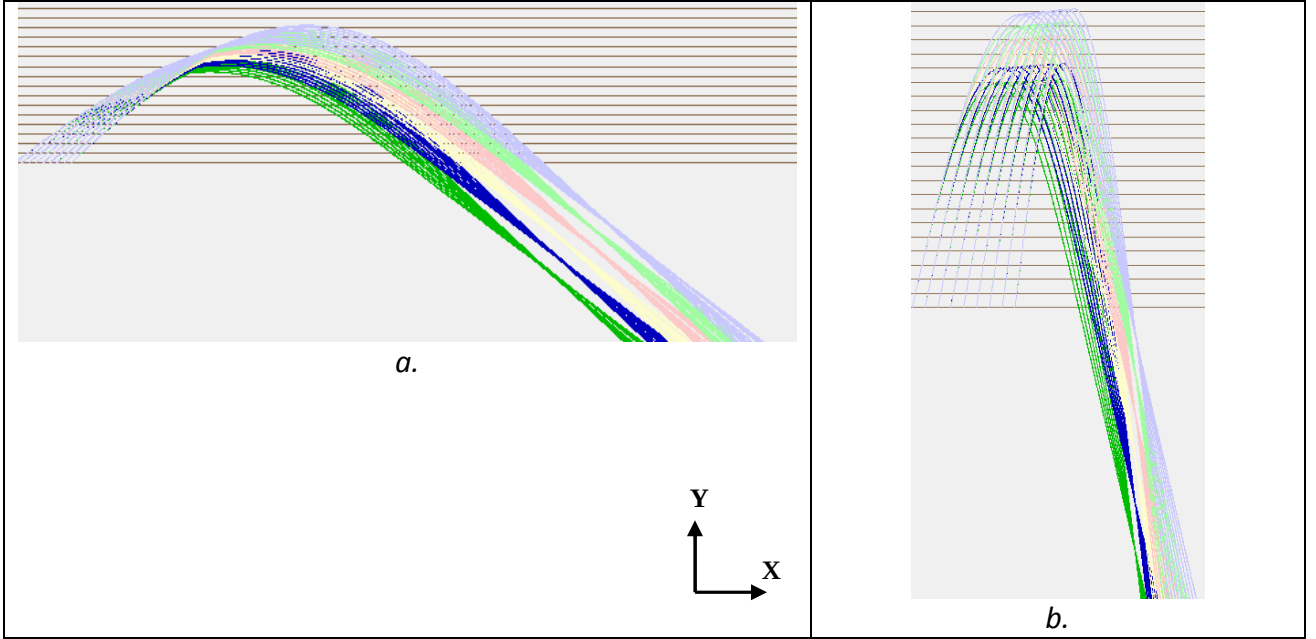


Figure IV-15 : a. Tir dans le réflectron avec un angle de 40°. La focalisation est moins bonne mais le plan de focalisation de séparation en énergie s'oriente perpendiculairement aux trajectoires de sortie. b. Tir dans le réflectron à 80°. La focalisation est meilleure mais le plan de focalisation s'incline. Tir de 90eV à 100eV avec une variation en énergie de 2eV et une ouverture angulaire de 5°.

D'après notre choix d'entrer avec un angle proche de 90°, il va falloir trouver une solution pour obtenir un plan de focalisation perpendiculaire aux trajectoires de sortie. Pour obtenir cela, nous avons à disposition les paramètres a et b qui, je le rappelle, sont les paramètres de variation du champ dans le réflectron. Pour se faire, l'équation $h(y_a, \theta)$ dans les deux plans va être établie, et la dérivée par rapport à l'énergie pourra donner une information sur les différentes possibilités en cherchant les minimums :

$$\frac{dh}{dE} = -\frac{\tan^2 \theta}{(1 + \tan^2 \theta)} \left[\sqrt{\frac{2}{aE}} \sin \theta \arctan\left(\frac{\sqrt{2Ea} \sin \theta}{b}\right) + \frac{2 \sin^2 \theta}{\left(b + \frac{2Ea \sin^2 \theta}{b}\right)} - \frac{4b \cos^2 \theta}{\left(b + \frac{2Ea \sin^2 \theta}{b}\right)^2} \right] \text{ pour } y_{ax} \quad (IV-20)$$

et

$$\frac{dh}{dE} = -\sqrt{\frac{2}{aE}} \arctan\left(\frac{\sqrt{2Ea} \sin \theta}{b}\right) - \frac{2 \sin \theta}{\left(b + \frac{2Ea \sin^2 \theta}{b}\right)} \text{ pour } y_{az}. \quad (IV-21)$$

En étudiant la variation du coefficient dh/dE en fonction de l'énergie, il s'avère que le plan devient horizontal lorsque l'énergie est augmentée mais sans jamais atteindre l'horizontalité. Il

ne faut pas oublier que la séparation en énergie sera plus difficile lorsque l'énergie moyenne augmente. Le même phénomène est observé pour l'augmentation des paramètres a et b . La *Figure IV-16* suivante montre l'impact de l'augmentation de l'énergie sur la séparation.

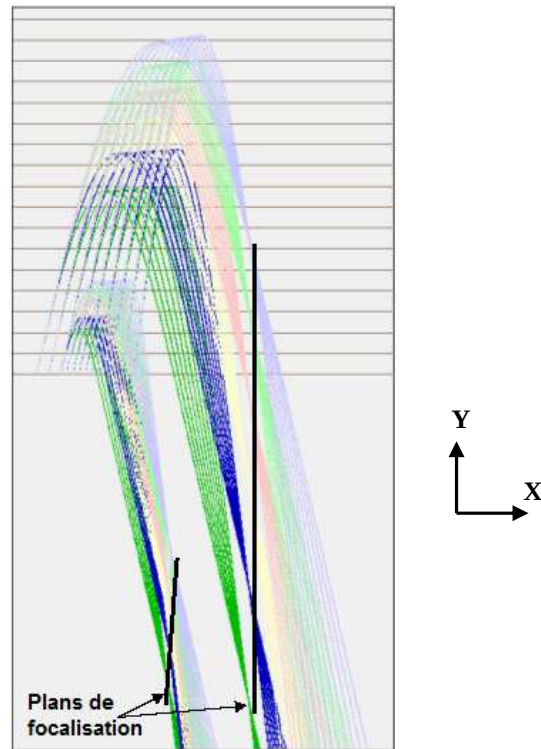


Figure IV-16 : Représentation de deux tirs sur lesquelles seul le paramètre de l'énergie est modifié.

Le tir de gauche correspond à une énergie plus élevée qui conduit à un plan de focalisation plus incliné par rapport aux trajectoires de sortie et donc à une séparation des impacts des particules à différente énergie moins bonne.

Il s'avère que l'option de l'utilisation des paramètres de champ du réflectron et d'énergie moyennes est inefficace pour l'amélioration de l'inclinaison du plan focal en sortie du réflectron. Il reste toutefois une possibilité puisque jusqu'à présent, les paramètres d'entrées des différentes énergies étaient identiques. La modification des valeurs de y_a en fonction de l'énergie pourrait être telle que les focalisations se placent sur un même plan parallèle par rapport à l'axe des X en sortie du réflectron.

Sur la *Figure IV-17.b*, les différents y_a ont été déterminés afin que la focalisation puisse se faire sur un plan horizontal. La *Figure IV-17.a* montre la différence de longueur focale nécessaire pour obtenir une focalisation sur le plan de sortie horizontal dans le cas où les deux énergies sont 5eV et 15eV. Dans cette situation, nos objectifs sont atteints.

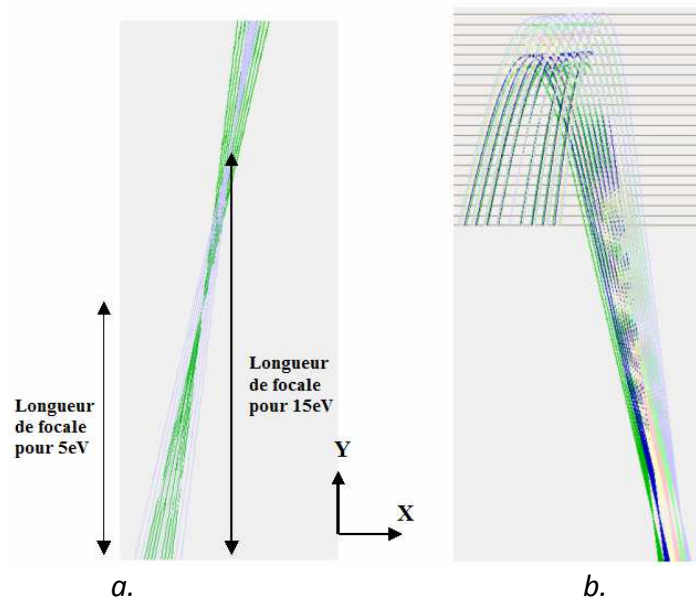


Figure IV-17 : a. Vue de y_a pour deux énergies, 5eV et 15eV où la différence de longueur de focale nécessaire pour une focalisation sur un plan horizontal est visible. b. Variation des y_a en fonction de l'énergie des particules afin d'obtenir un plan horizontal en sortie de réflectron pour des énergies de 5eV à 15eV par pas de 2eV.

La focalisation est possible sur un plan horizontal. Pour cela, il faut une longueur de focale en fonction de l'énergie. Il est nécessaire de s'assurer que cette solution soit réaliste. Une optique de focalisation va être placée à l'entrée du réflectron de manière à jouer ce rôle. Une étude va ensuite être faite en utilisant un faisceau de particules identique pour chaque énergie et nous observons l'inclinaison du plan focal en fonction du potentiel appliqué sur l'optique de focalisation qui est composée d'une lentille de Einzel (El-Kareh et al. 1970). En effet, les propriétés de longueur de focale d'une lentille de Einzel sont dépendantes de l'énergie des particules. Le principe d'une lentille de Einzel consiste à utiliser trois électrodes se plaçant autour du faisceau. L'électrode centrale est portée à un potentiel décélérateur ou accélérateur, les deux électrodes autour sont à la masse. La Figure IV-18 donne une représentation de cette lentille.

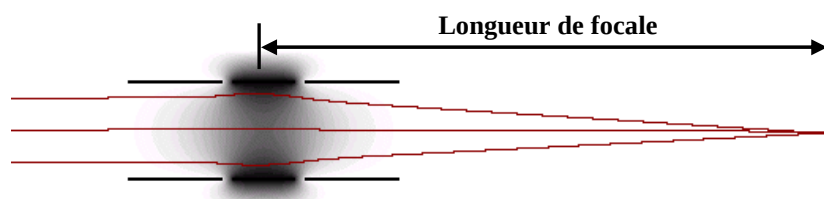


Figure IV-18 : Focalisation d'un faisceau de particules passant à travers une lentille de Einzel. La paire d'électrodes centrales est portée à un potentiel positif, les deux paires entourant la paire centrale sont à la masse. Tir pour une énergie donnée.

Comme le montre la *Figure IV-18*, la focalisation se fait pour une énergie donnée. Lorsque l'énergie de la particule est modifiée, la focalisation ne se fait plus au même endroit. Nous appelons cela une aberration chromatique. Il s'agit d'un défaut d'une lentille, notre but étant habituellement de la minimiser. Dans notre cas, cette aberration est bénéfique pour permettre une bonne focalisation en sortie du réflectron.

La *Figure IV-19* montre une lentille placée à l'entrée du TOF. Un tir d'une ouverture de 3° avec la même longueur de focale pour toutes les énergies est défini. La polarisation de la lentille va ensuite focaliser les particules en fonction de leur énergie de sorte que l'on retrouve un plan de focalisation horizontal à la sortie du TOF.

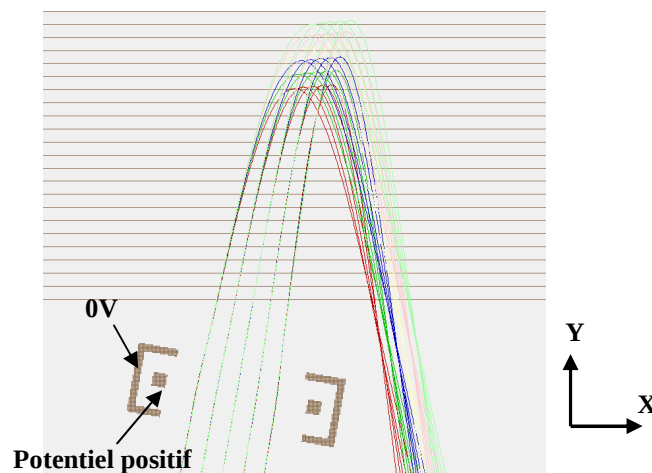


Figure IV-19 : Utilisation d'une lentille de Einzel permettant de corriger l'inclinaison du plan de focalisation à la sortie du réflectron.

La focalisation est corrigée dans ce plan. Cependant dans l'autre plan la focalisation ne se fait pas tout à fait à la même distance h de la sortie du réflectron comme le montrent les équations analytique dans le cas d'un tir à 80° en entrée dans le réflectron (*Figure IV-13*). Une autre lentille doit être placée dans l'autre plan avec un potentiel quelque peu différent afin d'obtenir une double focalisation dans le même plan.

En partant d'un modèle théorique, nous avons montré dans quel sens devait évoluer notre modèle réel afin d'obtenir les caractéristiques attendues :

- Utiliser de faibles énergies pour une séparation plus grande sur le plan focal de séparation en énergie.
- Prendre des paramètres a et b petits pour une meilleure séparation sur le plan focal.
- Prendre un angle θ proche de 90° pour plusieurs raisons :
 - minimisation de l'aberration en angle,
 - minimisation de l'aberration temporelle,
 - minimisation de l'aberration sur la fente d'entrée.

Notre objectif à présent est d'utiliser ce modèle théorique, de l'optimiser et de le transformer tout en conservant ses propriétés pour obtenir un modèle réalisable.

2.3.1.2. Adaptation du modèle théorique à un modèle réaliste

Après avoir réalisé l'étude théorique du réflectron, un modèle réaliste va être défini et optimisé. Le modèle réaliste doit utiliser un minimum de grille pour maximiser le flux. Des électrodes sont placées sur les bords (39 électrodes) et une électrode sur le dessus avec une grille dont le rôle consiste à fermer le réflectron au niveau de l'entrée et le plan de sortie du réflectron. Une polarisation à variation quadratique est adoptée comme dans le modèle théorique afin de focaliser sur le plan de sortie, comme le montre la *Figure IV-20*. A l'entrée du réflectron se trouve aussi une lentille de Einzel pour une bonne focalisation sur le plan de sortie.

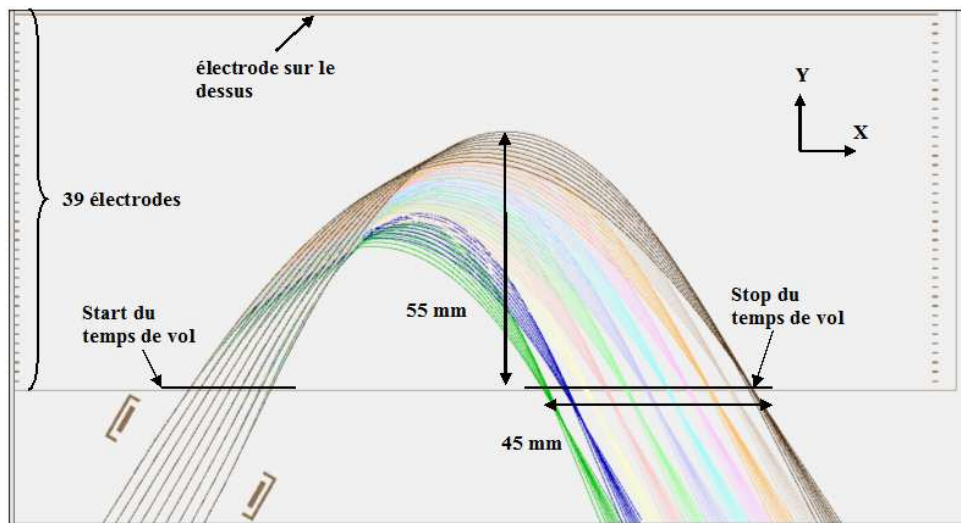


Figure IV-20 : Variation des énergies de 37.5eV à 67.5eV pas de 2.5eV. Chaque couleur représente une énergie avec en vert l'énergie la plus faible (37.5eV) et en brun l'énergie la plus élevée (67.5eV). 5° d'ouverture et même longueur focale y_{ax} pour toutes les énergies.

L'énergie moyenne est de 50eV avec une variation de ± 12.5 eV avec une ouverture de 5° et un angle moyen d'entrée de 60°. Il a été constaté que pour des raisons d'encombrement on ne peut pas conserver une direction d'entrée proche de la normale qui obligerait à avoir le détecteur trop près de l'entrée. En outre, le réflectron réel est constitué d'électrodes placées sur les bords et les trajectoires sont relativement différentes de celles qui sont calculées par le modèle théorique « parfait » utilisable dans SIMION (*Figure IV-21*) et envisagé jusqu'ici où le potentiel est imposé par des grilles totalement transparentes. Les résultats du modèle « réaliste » montrent qu'il faut que l'angle d'entrée soit $\sim 60^\circ$ pour conserver une bonne dispersion en énergie sur le détecteur. A partir de ce résultat qui est satisfaisant, nous pouvons passer à l'étude de la variation du temps de vol.

En théorie, chaque particule qui entre dans le réflectron à t_0 avec la même masse devrait arriver sur le détecteur avec le même temps t ceci indépendamment de l'énergie et de l'angle d'entrée. Pour obtenir cette condition, le potentiel appliqué dans le réflectron est de forme quadratique. Dans un cas réel, il est difficile d'obtenir une telle variation de potentiel car les électrodes sont placées sur les bords du réflectron, ce qui diminue les effets des électrodes au centre du modèle dans le plan XY. Dans le cas du modèle de la *Figure IV-20*, les potentiels sont appliqués suivant une variation quadratique sur les bords. Ceci aura pour effet d'avoir une variation quasi linéaire

au milieu du modèle et non plus quadratique. En réalité, comme on mesure pour chaque ion l'énergie par la position en Y du point d'impact on est capable, connaissant le temps de vol, de déduire la masse sans faire aucune hypothèse supplémentaire. On note cependant que l'aberration due à l'angle d'entrée est importante. Dans la suite de l'étude, nous allons définir l'aberration du temps de vol comme une aberration de dispersion en temps de vol donnée en %. Pour chaque énergie, il faut pouvoir différencier les masses en fonction du temps de vol des particules. L'aberration de dispersion en temps de vol va dire s'il est possible ou non de séparer et distinguer chaque masse. Pour une simulation, le temps de vol de chaque trajectoire est déterminé en définissant le temps "start" comme étant la position d'entrée dans le réflectron et la position "stop" le moment où se produit l'impact sur le détecteur. En faisant la différence entre ces deux temps, on détermine le temps de parcours des particules est défini. Ensuite, les temps maximums et minimums sont définis et le rapport de cette différence sur le temps moyen, en multipliant par 100, donne le pourcentage de dispersion en temps de vol. A titre de repère, une aberration <3% par énergie est nécessaire afin de pouvoir distinguer les masses 31 et 32 (qui correspondent aux objectifs instrumentaux). L'aberration de dispersion en temps de vol du modèle de la figure précédente est de l'ordre de 14%, ce qui est beaucoup trop pour une séparation des masses 31 et 32.

En comparaison, la *Figure IV-21* reprend le modèle théorique avec la même séparation en énergie et une énergie moyenne de 50eV. Ce modèle-ci donne une aberration de dispersion en temps de vol de 0.1%, largement suffisant pour nos objectifs.

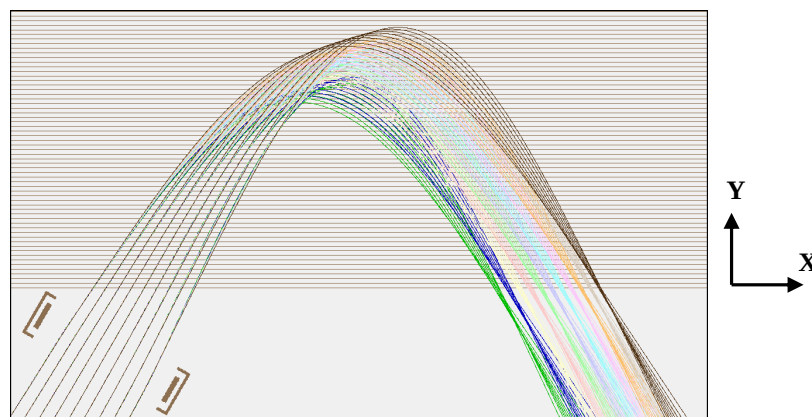


Figure IV-21 : Variation des énergies de 37.5eV à 67.5eV pas de 2.5eV dans le cas d'un modèle théorique de réflectron. La dispersion en temps de vol est de 0.1%.

L'utilisation d'une optimisation génétique va permettre de diminuer la dispersion en temps de vol tout en conservant les propriétés de séparation et de focalisation en énergie. Une description du principe d'optimisation est donnée dans la section suivante.

2.3.1.3. Optimisation du réflectron

L'optimisation du réflectron se fait dans un premier temps à partir d'un modèle 2D. L'objectif étant pour l'instant de focaliser en énergie tout en séparant convenablement les énergies sur le plan de focalisation avec une résolution <1eV et d'obtenir une résolution en masse de 32 au minimum, ce qui correspond à l'identification des espèces majoritaires autour des objets étudiés (voir section 1 du chapitre III). La symétrie dans le plan YZ permet de réaliser des modèles 2D du

réflectron à symétrie planaire, ce qui réduit le temps de calcul des cartes de potentiel. Plus tard, le rajout du déflecteur oblige le passage à un modèle 3D de l'instrument car le déflecteur fonctionne avec des potentiels dissymétriques (voir section 2.3.3 du chapitre IV).

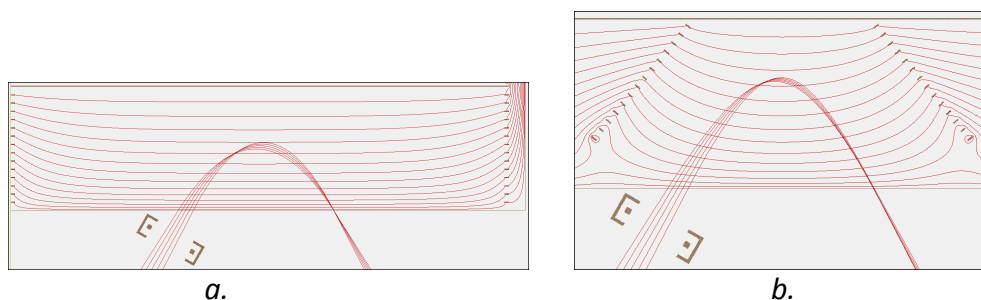
L'optimisation génétique va permettre au modèle de réflectron d'évoluer afin de diminuer la dispersion en temps de vol. Le choix des critères d'optimisation est important pour obtenir des solutions satisfaisantes. Dans un premier temps, l'optimisation va se faire sur la variation du potentiel le long de l'axe des Y au milieu du modèle selon l'axe X, lorsque la focalisation sur le plan de sortie est définie comme acceptable pour une énergie donnée. En effet, l'objectif étant d'atteindre une variation quadratique du potentiel au niveau du passage des particules dans le réflectron, utiliser la variation du potentiel comme critère d'optimisation est un bon moyen de tendre vers une solution acceptable. Les potentiels des électrodes varient selon une loi de variation dont les paramètres sont les variables de l'algorithme génétique. Dans un deuxième temps, le critère d'optimisation va résider dans la dispersion en temps de vol pour un tir à 87.5eV et 112.5eV avec une ouverture angulaire de $\pm 2^\circ$.

Pour s'assurer que l'instrument peut fonctionner dans un intervalle suffisant de distributions angulaires et d'énergie des ions à l'entrée nous prenons la précaution de varier ces paramètres au cours des simulations. De ce fait, les résultats d'optimisations montrent des variations de paramètres d'entrée jusqu'à obtenir les paramètres finaux.

Enfin, le critère d'optimisation va prendre en compte la focalisation en énergie sur le détecteur en faisant un tir de 11 énergies de 87.5 à 112.5eV avec un pas de 2.5eV ; les paramètres de variations étant toujours les lois de variation des potentiels des électrodes du réflectron ainsi que le potentiel de la lentille de Einzel. Pour cette troisième étape d'optimisation, l'objectif est la minimisation de $\Delta L/L$ qui correspond au rapport de la largeur moyenne d'une tache en énergie sur la largeur globale de l'image des énergies obtenue sur le plan du détecteur.

La variation des potentiels des électrodes du réflectron suit une loi allant de $\sqrt{x}$ à x^5 . L'énergie moyenne est de 100eV avec un ΔE de ± 12.5 eV, ce qui permet une accélération éventuelle pour une focalisation plus facile, avec une ouverture de 4° dans les deux plans lorsque le modèle est en 3D. Les résultats d'optimisation des potentiels ne sont pas concluants car la variation centrale reste linéaire. La conséquence vient du fait que les électrodes sont trop éloignées des trajectoires des particules pour que la variation du potentiel central évolue vers une variation quadratique, les électrodes doivent être plus proches du faisceau de particules.

La géométrie du réflectron va être modifiée en rapprochant les électrodes du faisceau de particules. La *Figure IV-22* suivante montre le modèle de base ainsi que 4 géométries simples pour le moment et différentes afin de déterminer leurs effets sur la variation du potentiel au centre du modèle selon le plan XY.



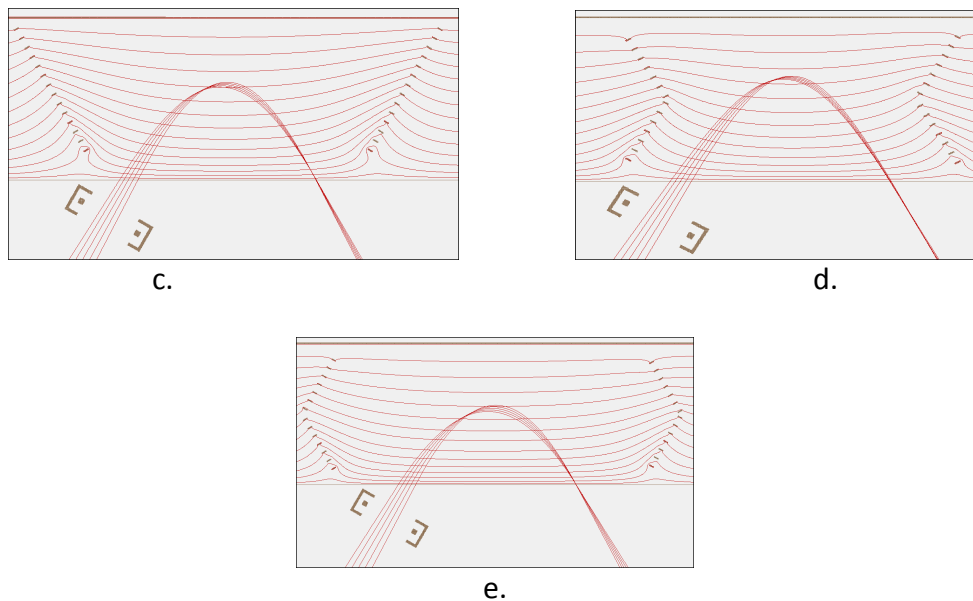


Figure IV-22 : Tir à 60° avec une ouverture angulaire de 6° pour différentes géométries de réflectron. a. modèle 0 b. modèle 1. c. modèle 2. d. modèle 3. e. modèle 4.

Pour les quatre géométries a, b, c et d, la focalisation se produit correctement. La variation du potentiel se rapproche d'une variation quadratique car les électrodes sont plus proches du faisceau particulaire. L'aberration de dispersion en temps de vol pour ces modèles est de l'ordre de 7%. Cette valeur prouve que l'optimisation va dans le bon sens, mais cela n'est toujours pas suffisant car il faut une dispersion en temps de vol de l'ordre de 3%. L'amélioration a été provoquée par le changement de géométrie. Force est de constater que le rapprochement des électrodes augmente le caractère quadratique de la variation du potentiel au centre du modèle. Dans ce cas, un nouveau modèle 1 a été conçu avec des électrodes du réflectron plus proches du faisceau. Pour que la focalisation se fasse correctement, l'angle d'entrée qui était de 60° est à présent de 55° . Pour la suite, tous les tirs se feront à 55° . La Figure IV-23 montre la variation du potentiel au centre du modèle pour chacun des modèles géométriques du réflectron en comparaison avec la variation théorique quadratique.

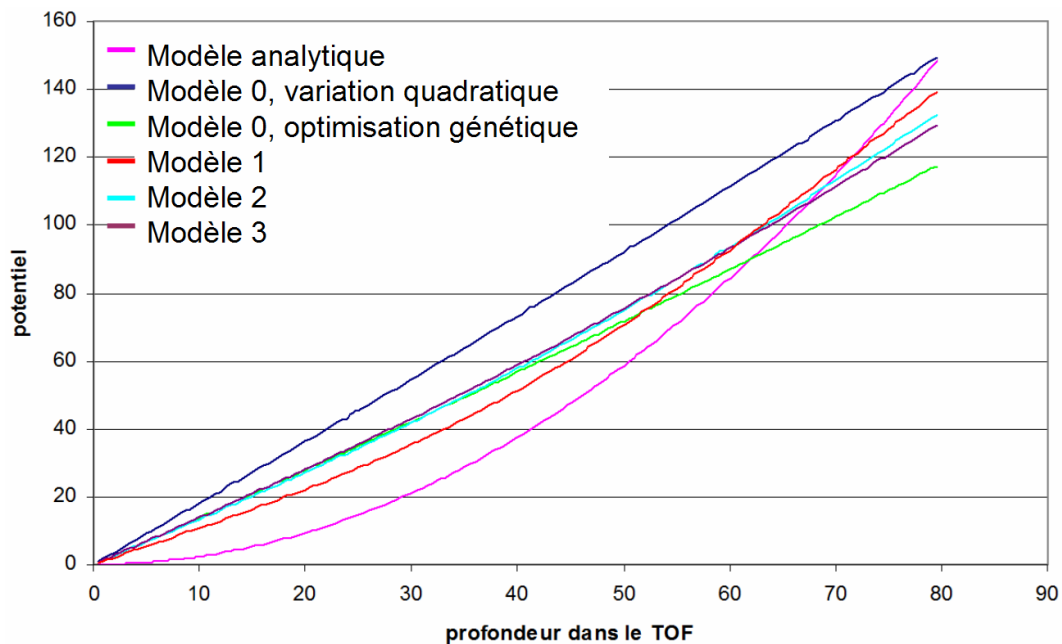


Figure IV-23 : Courbe de variation du potentiel au centre du réflectron dans le plan XY pour les différentes géométries de réflectron. Ces géométries sont à comparer avec le modèle analytique correspondant à la variation de potentiel du réflectron de la Figure IV-21. Le modèle 0, variation quadratique correspond aux potentiels théoriques dans le modèle 0 sans optimisation génétique. Les modèles 1, 2 et 3 correspondent à des résultats d'optimisation génétique pour chacun des modèles.

En comparant les variations de potentiel de la Figure IV-23, le modèle se rapprochant le plus du potentiel analytique est le *modèle 1*, avec des électrodes plus proches du faisceau de manière à obtenir une meilleure variation de potentiel. Les autres résultats sont similaires à des droites de variation de potentiel en fonction de la profondeur dans le réflectron.

Afin de conserver un flux maximum, nous avons également testé la mise en place d'une ouverture à l'entrée du réflectron pour éviter d'utiliser une grille. En effet, il faut s'assurer que la focalisation sur le plan focal se fasse toujours en appliquant une ouverture à l'entrée du réflectron. En effet une ouverture pourrait modifier les trajectoires des particules et détériorer ainsi les focalisations sur le plan de sortie ainsi que l'aberration en temps de vol.

En combinant l'ouverture au niveau de l'entrée du réflectron et en rapprochant au maximum les électrodes des trajectoires, le modèle suivant est dérivé du *modèle 1* de la Figure IV-23. Les électrodes étant proches des trajectoires, la variation de potentiel n'est plus linéaire mais de forme "quasi-quadratique". La Figure IV-24 montre la focalisation sur le plan de sortie pour différentes énergies. L'aberration de dispersion en temps de vol est alors de l'ordre de 2%.

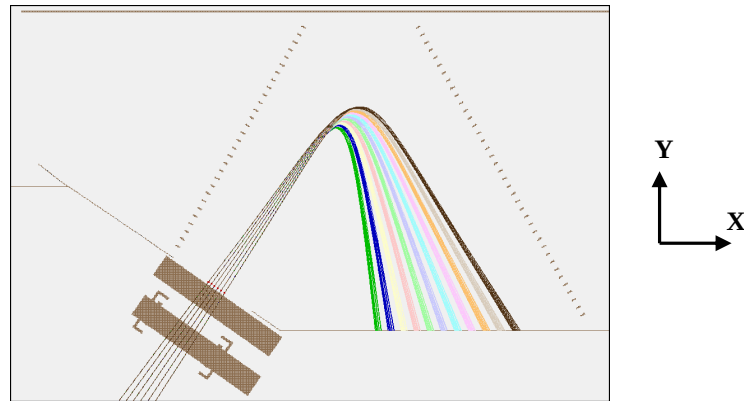


Figure IV-24 : Variation des énergies de 87.5eV à 112.5eV pas de 2.5eV. Modèle combinant l'ouverture au niveau de l'entrée de la grille et des électrodes plus proches du faisceau de particules.

Le modèle de la Figure IV-24 fonctionne correctement avec ~ 40 électrodes. Un modèle réaliste doit être composé de moins d'électrodes, c'est pourquoi un modèle avec 10 électrodes définissant le réflectron est conçu. Pour cela, l'emplacement des 10 électrodes est choisi en fonction des équipotentielles du modèle de la Figure IV-24, pour réaliser un modèle composé de 10 électrodes aux potentiels de : 10V, 20V, 30V, 40V, 50V, 60V, 90V, 110V, 130V et 150V comme le montre la Figure IV-25, l'énergie moyenne des particules étant toujours de 100eV.

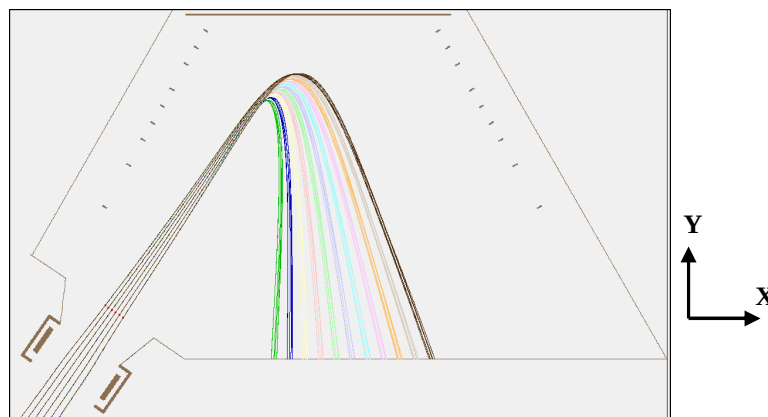


Figure IV-25 : Modèle de réflectron avec 10 électrodes de chaque côté, basé sur le modèle avec les électrodes proches des trajectoires et ouverture de l'entrée. Variation des énergies de 87.5eV à 112.5eV pas de 2.5eV, allant du vert au brun.

A nouveau, le modèle donne de bons résultats. Il est possible de modifier l'énergie moyenne des particules, et, par linéarisation des potentiels du réflectron, de focaliser sur le plan de focalisation. La finalité permettra d'augmenter la taille de la tache globale sur le plan de sortie lorsque l'énergie moyenne diminue. Ainsi, avec une énergie moyenne plus faible, il est possible d'augmenter la résolution en énergie. Pour le moment, à 100eV d'énergie moyenne, la tache globale fait ~ 35 mm pour une séparation de 25eV et une résolution de l'ordre de 1eV.

L'angle d'injection à l'entrée dans le réflectron est de 55° . Une étude sur la variation de cet angle donne la sensibilité de l'instrument en fonction de ce paramètre. Il s'avère que la variation de $\pm 1^\circ$ fait varier toute l'image globale le long du plan focal de sortie mais ne détériore pas la focalisation sur celui-ci. La variation de cet angle peut être dangereux quant à l'emplacement du détecteur sur le plan de sortie, ce paramètre est donc primordial pour le bon fonctionnement de l'instrument.

Pour simplifier l'interface avec les optiques de focalisation qui vont être développées par la suite, le modèle subit une rotation comme le montre la *Figure IV-26*. Celle-ci illustre aussi la dernière évolution du réflectron qui consiste à avoir un plan selon l'axe Y à droite augmentant les performances de focalisation et de temps de vol, sachant que le plan focal se situe sur ce plan selon l'axe Y.

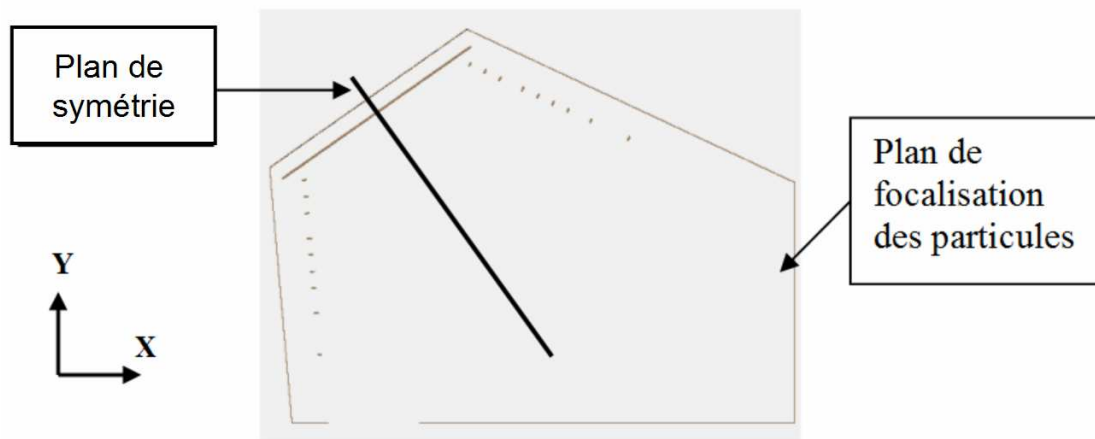


Figure IV-26 : Rotation du réflectron pour faciliter l'interface avec les optiques de focalisation. Rajout d'un plan selon l'axe Y qui augmente les performances de focalisation et de temps de vol du réflectron. Les électrodes du réflectron sont agencées de manière à obtenir un plan de symétrie.

Le réflectron se compose au final de 21 électrodes dont les potentiels sont encore ajustables en fonction du faisceau qui entre dans l'instrument et de l'optique qui se trouve en amont. Ces potentiels sont symétriques 2 à 2 par rapport au plan de symétrie (*Figure IV-26*).

Le réflectron est défini dans le plan XY, un autre plan de symétrie est défini selon le plan YZ. Les électrodes du réflectron ont la forme de barres dont la longueur va être définie par la taille de la zone de déflexion du déflecteur. Le faisceau de particules sera dévié selon l'axe des Z afin de déterminer la masse des particules. La déviation doit se faire sur une distance maximale, pour augmenter la résolution en masse. L'instrument ne pouvant pas être très grand selon cet axe, le faisceau de particules sera proche des bords de l'instrument lorsque la déflexion sera maximale. Afin d'assurer une bonne continuité du potentiel selon l'axe Z, des électrodes sont définies et placées sur les côtés du réflectron afin de diminuer les effets de bord. Ces électrodes sont définies à partir des équipotentielles du plan XY du centre du modèle dans le plan YZ et placées aux extrémités du modèle comme le montre la *Figure IV-27* qui est une vue générale du réflectron dans le plan YZ.

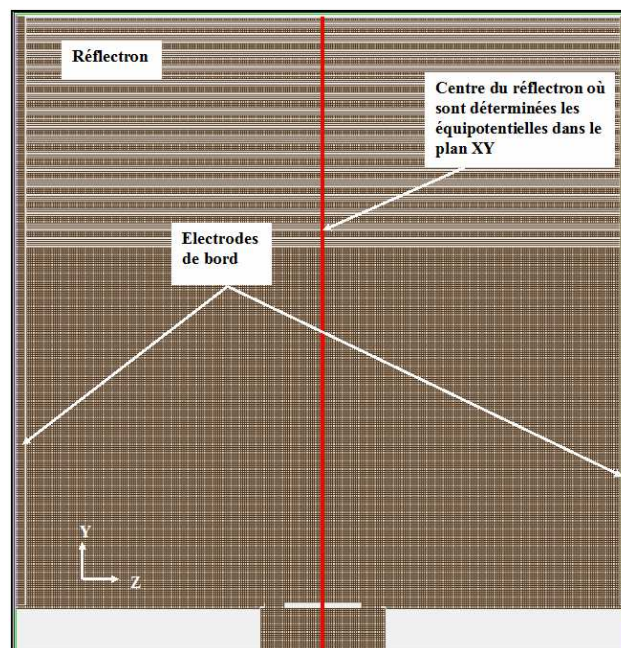


Figure IV-27 : Représentation du réflectron dans le plan YZ où est désigné l'emplacement des électrodes de bord.

Pour définir les électrodes de bord du réflectron, une série d'équipotentiels au centre du modèle est dessinée. Ces équipotentiels sont définies à partir de l'optimisation finale des potentiels qui correspond à une énergie moyenne du faisceau de 50eV et une bande en énergie de 10eV montrées sur la Figure IV-28. Ce changement d'énergie moyenne a été réalisé afin d'augmenter la résolution en énergie de l'instrument.

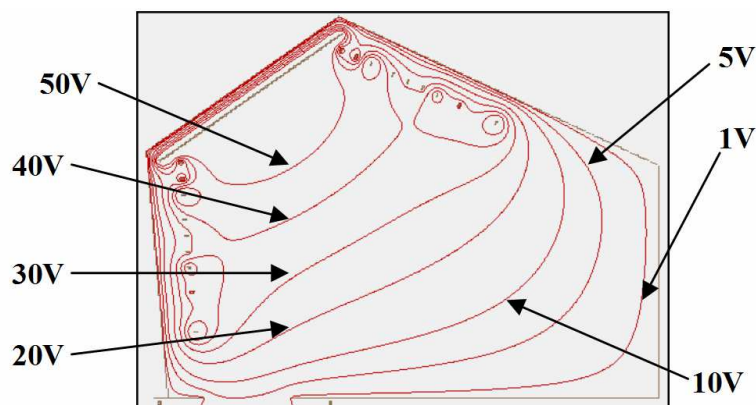


Figure IV-28 : Vue en coupe au centre du réflectron avec les équipotentiels en rouge. Les électrodes de bord du réflectron correspondent aux surfaces entre les équipotentiels portées à des potentiels moyennés, pour un fonctionnement avec un faisceau de particules de bande d'énergie de 10eV de 45eV à 55eV, obtenu lors de la dernière optimisation génétique.

Les électrodes de bord sont définies à partir des dix équipotentiels de la Figure IV-28. Ces électrodes sont définies par le changement de potentiel correspondant aux équipotentiels. Les valeurs de potentiel sont données par la moyenne des deux équipotentiels définissant la forme

de l'électrode. La *Figure IV-29* montre l'allure des différentes électrodes sous SIMION®. Chaque électrode est définie par une couleur.

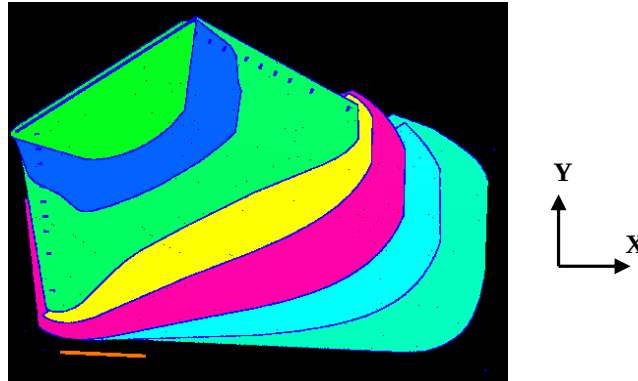


Figure IV-29 : Représentation des électrodes de bord. Chaque couleur représente une électrode. Les lignes bleu foncé marquent la séparation entre chaque électrode.

Ce nombre d'électrodes suffit pour rendre les effets de bord négligeables dans le modèle de réflectron en 3D.

2.3.2. Du réflectron à la source d'ionisation

La caractéristique principale du faisceau en entrée du réflectron consiste à être convergent avec une focale de 110mm depuis l'entrée dans le réflectron pour toutes les énergies et une ouverture angulaire de 5° pour obtenir une focalisation des particules sur le plan de sortie (modèle théorique). Cette entrée correspond à une source ponctuelle de fente nulle avec une ouverture angulaire comme le montre la *Figure IV-15.a*. Le but de l'étape suivante va être de conserver au mieux les propriétés du réflectron tout en considérant au final un faisceau dont les caractéristiques coïncident à la sortie de la source d'ionisation. Ce changement doit s'opérer de manière constructive afin de conserver les propriétés du réflectron car il faut noter que la sortie de la source d'ionisation est définie comme une ouverture de $\sim 1\text{mm}^2$ avec une ouverture de 10° et une ouverture en chaque point de 5° sur chaque point d'entrée, très différent de l'entrée dans le réflectron. Dans un premier temps, nous allons faire fonctionner le réflectron à partir d'un faisceau parallèle. Pour cela, la lentille de focalisation, que nous avons évoquée dans la partie 2.3.1.1 du chapitre IV, va devoir évoluer afin de remplir ce rôle. Cette focalisation doit s'opérer dans les deux plans, de ce fait, une lentille circulaire devrait pouvoir s'adapter. Il a cependant été constaté que l'utilisation d'une double lentille de focalisation, la première focalisant en énergie, la deuxième en masse, ne pouvait fonctionner puisqu'elles deviennent dépendantes l'une de l'autre. Le choix est alors porté sur l'optimisation de deux lentilles, optimisées séparément. La suite de l'étude est décomposée en plusieurs parties, à savoir, la lentille de focalisation en énergie que nous nommons lentille XY (fonctionnant dans le plan XY), une lentille de focalisation dans le plan de la masse (lentille YZ) et une optique d'accélération et de focalisation en sortie de la source d'ionisation.

La lentille XY se trouve dans le même plan et au même endroit que la lentille de focalisation de la partie théorique, mise à part que celle-ci doit focaliser un faisceau parallèle. Son rôle est d'obtenir une image sur le plan de sortie du réflectron avec une distribution en énergie sur une gamme de 10eV et une résolution $< 1\text{eV}$. En rajoutant cette lentille, la longueur de focale varie en fonction de l'énergie du faisceau, ce qui complique l'optimisation de cette lentille pour focaliser sur le plan de sortie. Les effets de variation de focale en fonction de l'énergie sont trop importants pour être négligés. Le principe va consister à utiliser une lentille d'Einzell composée de plusieurs électrodes loin du faisceau. Le fait de se placer loin du faisceau va permettre d'augmenter les possibilités de solutions lors de l'optimisation. C'est pourquoi la lentille initiale est composée de 6 électrodes. L'optimisation se fait par un algorithme génétique ou le critère d'optimisation est la minimisation de $\Delta L/L$ qui est le rapport de la largeur moyenne de tache par énergie sur la taille globale de l'image et la minimisation de la dispersion en temps de vol. L'optimisation se fait sur un faisceau à 100eV de moyenne et une bande de 10eV. Le résultat est représenté sur la *Figure IV-30.a*. La dispersion en temps de vol est de l'ordre de 2.5% qui est acceptable, cependant la taille de l'image ne permet pas une résolution inférieure à 1eV.

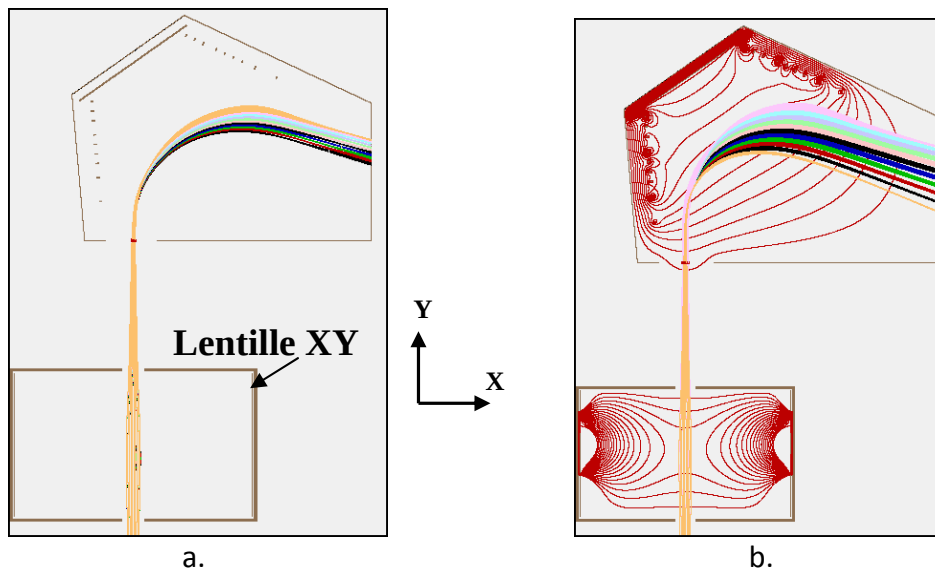


Figure IV-30 : a. Vue du réflectron et de la lentille XY composée de 6 électrodes loin du faisceau. Résultat obtenu à partir d'une optimisation génétique sur les potentiels de la lentille. En entrée, un faisceau de 5mm de diamètre et une énergie de 95eV à 105eV par paquets de 1eV, taille de l'image globale de ~11mm et une dispersion en temps de vol de l'ordre de 2.5%. b. Même modèle mais pour une optimisation de faisceau avec une énergie moyenne de 50eV, de 45eV à 55eV par paquets de 1eV, taille de l'image globale de ~35mm et une dispersion en temps de vol de l'ordre de 1.5%. Les équipotentielles en rouge sont représentées afin de voir les effets de la lentille XY.

La solution adoptée consiste à réduire l'énergie moyenne du faisceau de particules, passant de 100eV en moyenne à 50eV. Une autre solution aurait été d'agrandir le réflectron de façon homothétique dans le but d'agrandir l'image sur le plan focal. Or nous n'avons pas pu retenir cette solution puisque le réflectron deviendrait trop grand pour passer d'une image de 10mm à 30mm (3 fois plus grand). Pour cette optimisation, les potentiels du réflectron sont aussi des paramètres libres de l'algorithme génétique, laissant ainsi plus de chance à l'obtention d'une

solution. Le résultat est donné sur la *Figure IV-30.b*, qui donne une image globale de $\sim 35\text{mm}$, une résolution inférieure à 1eV et une dispersion en temps de vol de 1.5% . Les équipotentielles sont aussi représentées en rouge afin de montrer le fonctionnement de la lentille XY.

La difficulté de cette optimisation est de faire focaliser toutes les énergies sur le même plan focal à partir d'un faisceau parallèle. Le modèle de lentille de la *Figure IV-30.b* avec les équipotentielles résout ce problème.

La focalisation fonctionne bien dans le plan de séparation des énergies. La prochaine étape vise à rajouter une lentille qui va focaliser dans le plan des masses à partir de ce même faisceau parallèle. A ce stade il y a à nouveau le problème de la focalisation en énergie mais il est moins important dans ce plan.

La lentille YZ est une lentille fonctionnant dans le plan de détermination des masses. La tâche de focalisation doit être de l'ordre du mm dans le but de pouvoir séparer correctement les différentes masses. Le principe d'optimisation est le même que celui de la lentille de focalisation XY. Comme l'effet de différence de focalisation en fonction de l'énergie est moins important, la taille de cette lentille peut-être plus petite. Pour le prototype, cette lentille est composée de deux électrodes indépendantes. Celle-ci se trouve entre la lentille de focalisation XY et le déflecteur. Fonctionnant dans le même plan que ce dernier, ils font partis du même élément. La *Figure IV-31* montre une vue en coupe de la lentille YZ.

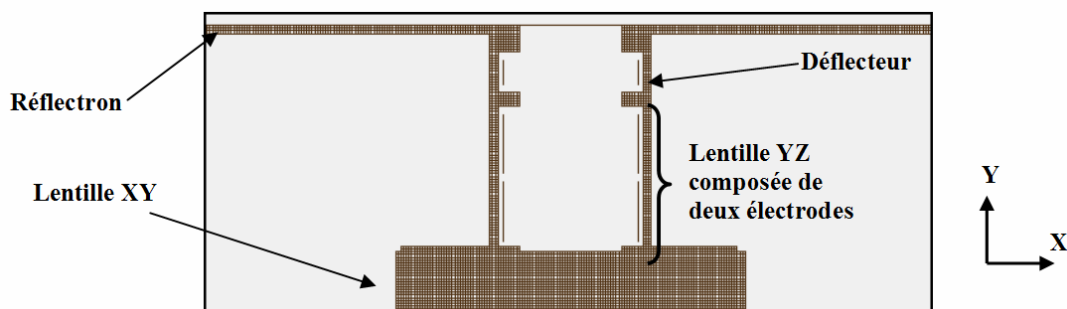


Figure IV-31 : Vue en coupe de la lentille YZ, composée de deux électrodes indépendantes et faisant partie du bloc lentille YZ/déflecteur.

L'optimisation de cette lentille se fait en dernier car les premiers objectifs de l'optimisation sont la résolution en énergie, la taille de l'image en énergie et l'aberration de dispersion en temps de vol. Selon l'axe Z, le réflectron possède les mêmes propriétés de variation de potentiel. Une lentille d'Einzels simple devrait suffire pour focaliser les particules selon cet axe, d'où le nombre de deux électrodes dont une optimisation simple donnera de bons résultats.

Une optique d'accélération et de focalisation est ajoutée entre la source d'ionisation et le système de lentilles. Celle-ci est une optique cylindrique centrée sur le faisceau de particules se trouvant à la sortie de la source d'ionisation. Les propriétés de sortie de la source d'ionisation des particules ne sont pas encore connues car la source d'ionisation est encore en cours de développement. L'objectif de l'optimisation de cette optique est de transformer un faisceau ayant une ouverture et une surface d'entrée qui se définit comme étant une possibilité de sortie de la future source d'ionisation en un faisceau parallèle d'un diamètre de 5mm qui correspond à l'entrée dans la lentille XY. L'énergie de sortie de la source d'ionisation varie entre 5eV et 15eV ,

une accélération de 40V est donc possible pour atteindre une énergie de 50eV en moyenne. L'optique est composée de 9 lentilles sous forme d'anneaux.

A l'origine, cette optique était composée de 18 électrodes dont la taille globale de l'optique était identique, donc des anneaux plus petits. Une étude sur les premiers résultats d'optimisation a révélé le fait que la réduction du nombre d'électrodes était possible. Une vue en coupe est donnée sur la *Figure IV-32.a*. La jonction entre la source d'ionisation et l'optique d'accélération se fait par une grille à 0V qui est montrée sur la *Figure IV-32*. Un programme d'optimisation génétique a été développé afin d'obtenir un faisceau parallèle en sortie avec une énergie variant de 45eV à 55eV.

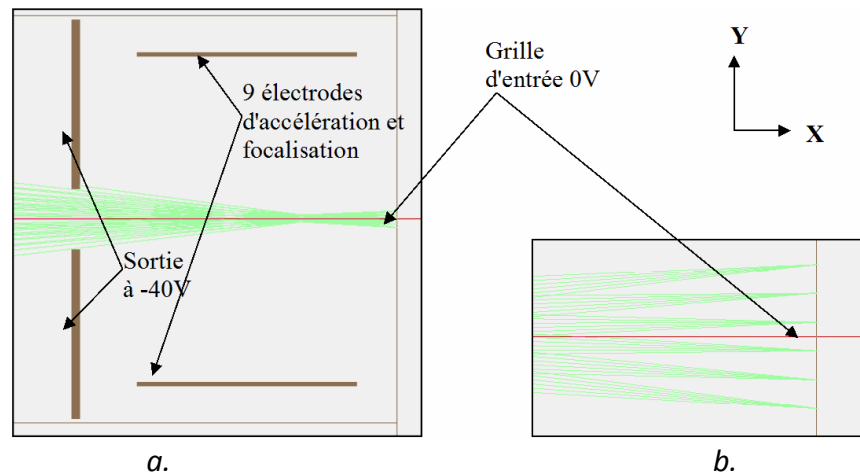


Figure IV-32 : a. Vue en coupe de l'optique d'accélération et de focalisation. L'entrée se trouve à droite de l'image, qui correspond à la sortie de la source d'ionisation. L'énergie est de 5eV et l'énergie de sortie est de 45eV. L'optimisation génétique se fait sur les potentiels de l'optique. b. Zoom de l'entrée où se trouve une grille d'interface entre l'optique de focalisation et la source d'ionisation.

Le faisceau de particules est défini arbitrairement à partir d'une distance focale d , d'une ouverture angulaire α et d'une ouverture angulaire en chaque point β expliqué sur la *Figure IV-33* qui correspondra à la future sortie de la source d'ionisation. Après plusieurs optimisations, les angles α et β ont du être réduits afin d'obtenir des résultats satisfaisants en sortie d'optique d'accélération. Au final, les paramètres de sortie de la source d'ionisation sont : $d=5\text{mm}$, $\alpha=10^\circ$ et $\beta=5^\circ$.

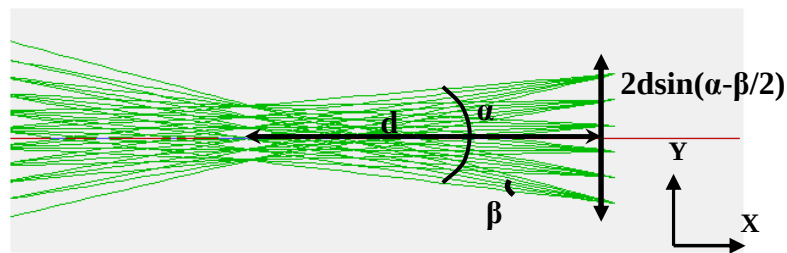


Figure IV-33 : Vue de l'entrée de l'optique où sont définis les paramètres de définition du faisceau. d représente la focale qui est de 5mm, α est l'angle d'ouverture sur la source d'ionisation qui est de 10° et β est l'angle d'aberration sur chaque point de l'ouverture qui vaut 5° .

En sortie de l'optique de focalisation, le faisceau doit être parallèle avec un diamètre de 5mm. Afin de s'assurer de son parallélisme, le critère de sélection se fait sur la minimisation de l'angle entre le vecteur vitesse de la particule et l'axe de rotation de l'optique (axe X). En fonction des résultats, un couplage dans le modèle composé du reste de l'instrument est réalisé dans le but de vérifier le bon fonctionnement de l'instrument. La *Figure IV-34* suivante montre l'un des résultats d'optimisation génétique de l'optique d'accélération. La difficulté pour cette optimisation est à nouveau le fait que le faisceau doit être parallèle quelle que soit l'énergie des particules. Comme l'énergie des particules est faible, les effets de différence de focalisation en fonction de l'énergie sont plus importants. De ce fait, les potentiels appliqués sur les électrodes sont élevés ($\sim 300V$).

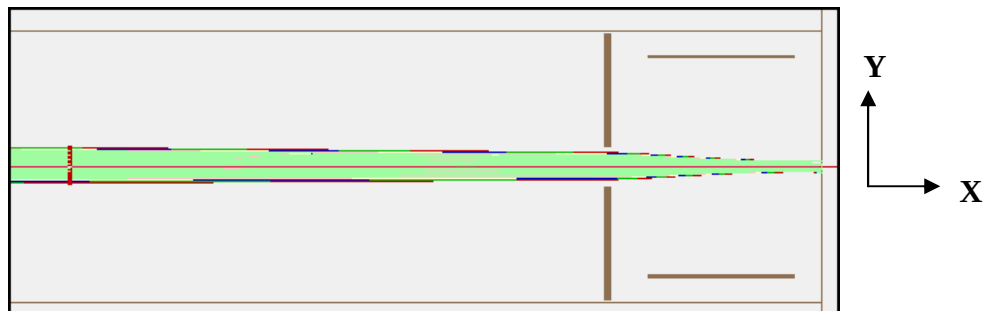


Figure IV-34 : Résultat d'optimisation génétique de transformation du faisceau depuis la sortie de la source d'ionisation. Plusieurs énergies sont focalisées, de 5eV à 15eV par paquets de 2eV. L'analyse du critère d'optimisation se fait au niveau des pointeurs rouges à gauche de l'image, les particules vont de droite à gauche. L'énergie des particules en sortie de l'optique de focalisation est de 50eV pour une accélération de 40V.

Les résultats sont assez satisfaisants pour pouvoir réaliser un modèle global où l'optique de focalisation est greffée au modèle de réflectron et de lentilles. La partie suivante va reprendre le modèle complet et permettre de mettre en exergue une étude des performances.

2.3.3. Du déflecteur à la masse des particules

Le problème, déjà évoqué précédemment dans l'utilisation d'un analyseur temps de vol, est la détermination du temps "start" des particules, le temps "stop" étant défini par l'impact sur le détecteur. A l'entrée du réflectron, on place un déflecteur qui va défléchir le faisceau en fonction du temps, permettant ainsi de déterminer le temps de départ des particules (concept de STROFIO, S.Orsini 2010).

Le déflecteur est une lentille de Einzel qui va permettre de dévier les trajectoires des particules en fonction du temps pour en déterminer leur masse. Un potentiel dissymétrique centré sur le potentiel global de l'instrument est appliqué afin de défléchir le faisceau dans le réflectron, lorsque l'une est positive, la deuxième est négative. Le déflecteur se trouve à l'entrée du réflectron et est composé de deux électrodes sous formes de barres placées dans une cage au potentiel de l'instrument pour que l'espace de champ soit petit (principe de la lentille de Einzel). La rampe de variation linéaire du potentiel en fonction du temps est déterminée à partir du temps de vol des particules les plus lourdes à analyser.

Les particules entrant dans le réflectron vont voir le potentiel du déflecteur modifiant ainsi la position d'impact sur le détecteur en fonction du potentiel déflecteur selon l'axe Z des masses. Cette position est associée, suivant un axe, à la dispersion en énergie produite par l'analyseur et, suivant un autre axe perpendiculaire, à la déflexion induite par le déflecteur c'est à dire au temps de passage de la particule à travers le déflecteur. Le potentiel du déflecteur varie dans le temps sous la forme d'une dent de scie. La Figure IV-35 donne une représentation de la position d'impact associée à la variation de potentiel de dent de scie du déflecteur. La variation se fait sur deux parties, selon l'axe Z donné sur la Figure IV-35. La première, variant du temps 0 à t_3 avec une variation de potentiel positive (électrode gauche du déflecteur positive, celle de droite étant négative). La deuxième partie variant de t_3 à t_6 avec une variation de potentiel négative (électrode gauche du déflecteur négative, celle de droite positive). Le détecteur fonctionne sur deux parties en vue de laisser le temps aux particules les plus lourdes d'atteindre le détecteur. A partir de la Figure IV-35, il est possible d'associer la position d'impact sur le détecteur au potentiel de dent de scie, donc à l'instant où la particule est passée au niveau du déflecteur, le temps "start" est défini. Le temps "stop" est donné par le temps de l'impact de la particule sur le détecteur. A l'aide du temps "start" et du temps "stop", le temps de trajet est déterminé. La masse peut-être déterminée à partir du temps, la distance parcourue et de l'énergie (donnée par la position de l'impact le long de l'axe de l'énergie).

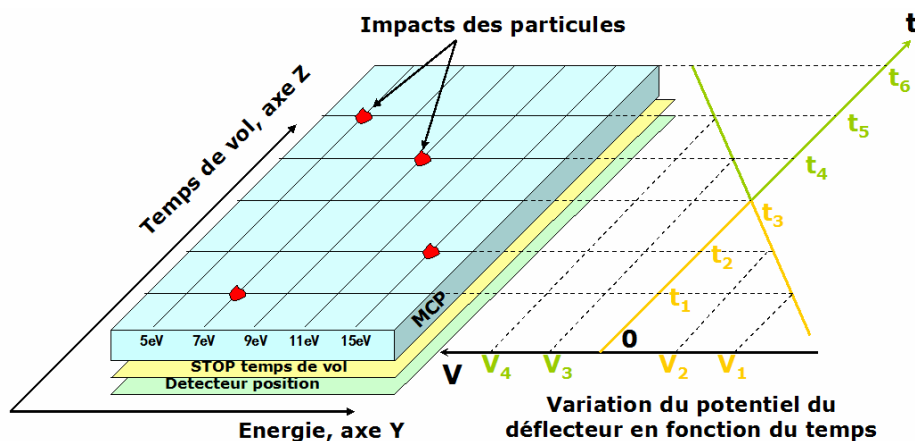


Figure IV-35 : Schéma d'explication du temps de vol. L'impact sur le détecteur associé à un potentiel donné du déflecteur donne le moment où la particule est passée au niveau du déflecteur. L'ion 1 va voir un potentiel V_1 pour impacter le détecteur à une position Z_1 . La position Z_1 donne l'information du potentiel V_1 au moment où la particule passe dans le déflecteur. La connaissance de la variation du potentiel en fonction du temps nous permet de connaître le temps "start" de la particule. Le temps "stop" correspond à l'impact sur le détecteur, qui est basé sur le temps de référence de l'instrument. $T_{stop} - T_{start}$ = temps de vol de la particule. La masse peut alors être déterminée.

La courbe jaune de potentiel correspond à une déflexion sur un détecteur, la partie verte correspond à deuxième détecteur, permettant ainsi d'augmenter le temps effectif de mesure de l'instrument. L'objectif est de placer deux détecteurs avec deux électroniques indépendantes permettant de réaliser deux mesures consécutives. L'inconvénient de la mesure de la masse par le temps de vol des particules est de devoir laisser arriver toutes les particules sur le détecteur avant de recommencer une mesure même si nous utilisons un déflecteur. Dans le cas contraire la

mauvaise interprétation des données est possible. Le temps de vol maximal est donné par les particules les plus lourdes. Si une particule lourde entre dans le réflectron en fin de rampe, il faut attendre le temps que cette particule arrive sur le détecteur. L'idée est alors d'utiliser le deuxième détecteur qui recommence la mesure pendant que le premier détecteur finit son cycle de mesure. Ce principe permet de réduire le temps mort de la mesure à 5%.

A partir de ce principe, le rajout du déflecteur se fait pour un modèle 3D et l'étude de la déflexion du faisceau dans le plan des masses est réalisée. L'image sur le détecteur est de l'ordre de 2mm le long de l'axe des Z. En polarisant jusqu'à +30V d'un côté et -30V de l'autre le déflecteur, l'image bouge le long de l'axe des Z de +20mm. En inversant ensuite les potentiels +30V et -30V du déflecteur, il est possible de recouvrir 20mm sur le détecteur dans le plan de séparation des masses, comme le montre la *Figure IV-36*.

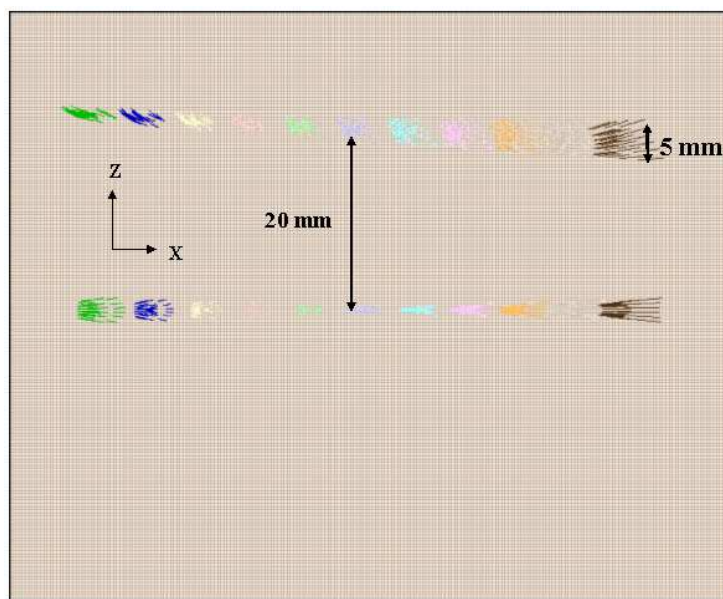


Figure IV-36 : Variation des énergies de 87.5eV à 112.5eV par pas de 2.5eV (chaque couleur). La ligne du bas correspond au déflecteur polarisé à 0V, celle du haut à +/-30Volt. La tache fait 5mm au maximum selon l'axe Z, qui correspond à l'axe de détermination des masses.

2.3.4. Modèle final du prototype et performances

Après avoir optimisé chaque partie, les différents éléments sont assemblés dans un seul modèle 3D. La taille de la maille est de 0.4mm, ce qui est suffisant pour définir le modèle pour les géométries conçues. Le modèle est composé de l'optique d'accélération, des lentilles XY et YZ, du déflecteur et du réflectron. La *Figure IV-37* suivante montre les différentes parties de l'optique ainsi qu'un tir de particules depuis la sortie de la source d'ionisation avec des énergies de 5eV à 15eV par paquets de 2eV. La taille de l'instrument y figure également.

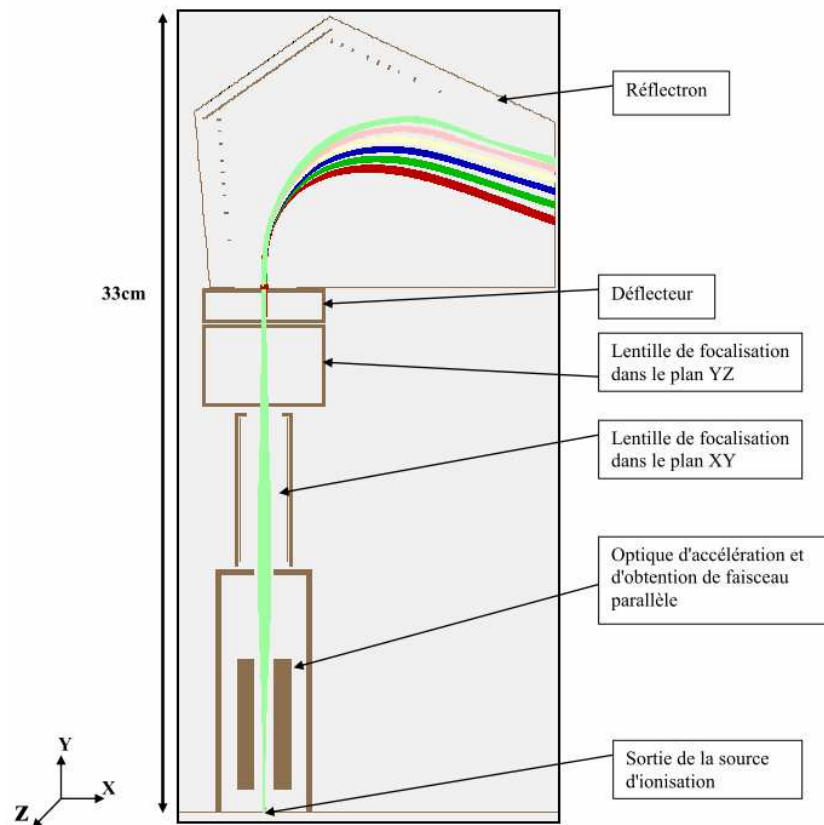


Figure IV-37 : Coupe du modèle optique. A l'entrée de l'optique sont injectées des particules de différentes énergies à travers un point de focalisation (bas de la figure). Ce faisceau traverse l'optique de focalisation est ensuite séparé en énergie (différentes couleurs en haut de la figure) et va impacter le détecteur (en haut à droite de la figure). Sur cette figure, une séparation des énergies de 5eV à 15eV du bas vers le haut avec un échantillonnage par paquets de 2eV est montrée.

Ce modèle va servir de base pour concevoir le premier prototype de l'instrument NIMEIS. Chaque élément est mis en contact simplement pour faciliter le montage du prototype. Jusqu'à présent, nous n'avons pas parlé des valeurs de potentiels des différentes électrodes. Maintenant que nous avons obtenu un modèle final, la Figure IV-38 donne un diagramme de l'instrument, qui récapitule tous les potentiels de l'instrument.

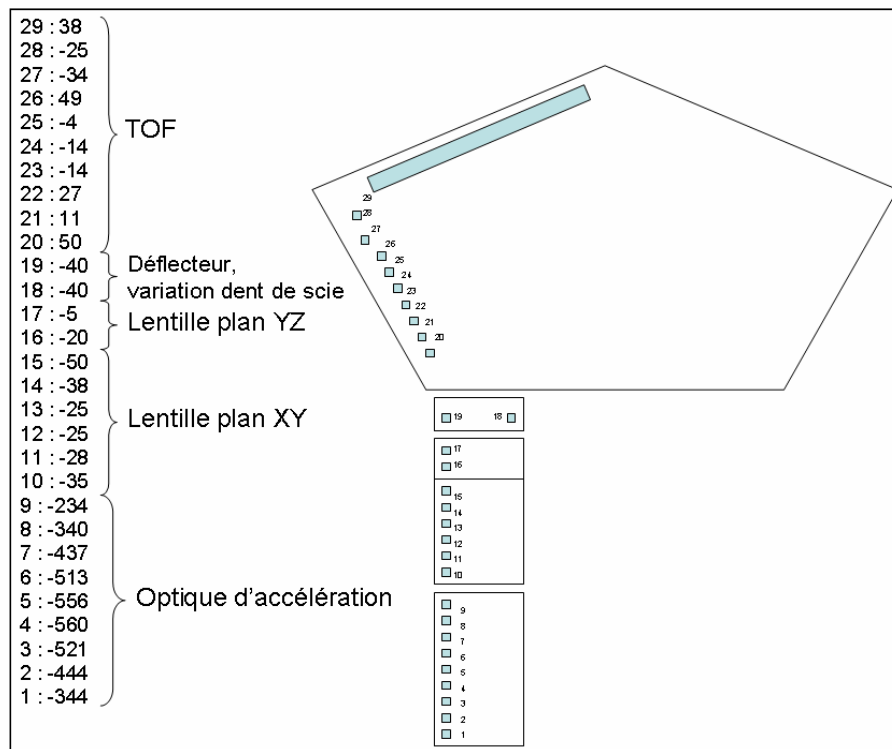


Figure IV-38 : Schéma de principe de l'instrument en associant les valeurs de potentiel de chaque électrode.

A partir des propriétés en entrée de la source d'ionisation, le calcul des performances de l'instrument en terme de résolution en énergie et en masse a été effectué. La Figure IV-39 détaille un agrandissement du détecteur dans le plan XY. Chaque couleur correspond à une énergie allant de 5 à 15eV par pas de 2eV. Cette figure montre qu'avec ce principe, NIMEIS est capable d'obtenir une résolution supérieure à 1eV. Cette résolution n'est pas constante sur une gamme d'énergie comme le montre la taille variable de chaque paquet d'énergie à leur arrivée sur le détecteur. Sur la Figure IV-40, nous effectuons un zoom sur la région autour de l'énergie 5eV.

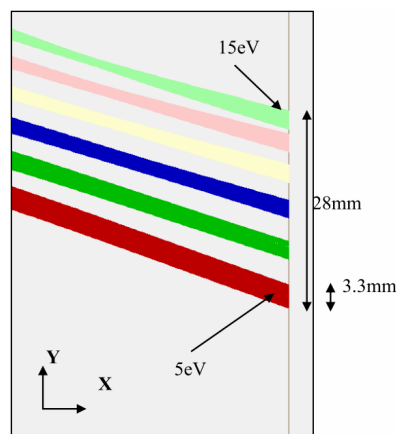


Figure IV-39 : Agrandissement de la zone d'impact des particules sur le plan de sortie du réflectron pour différentes énergies.

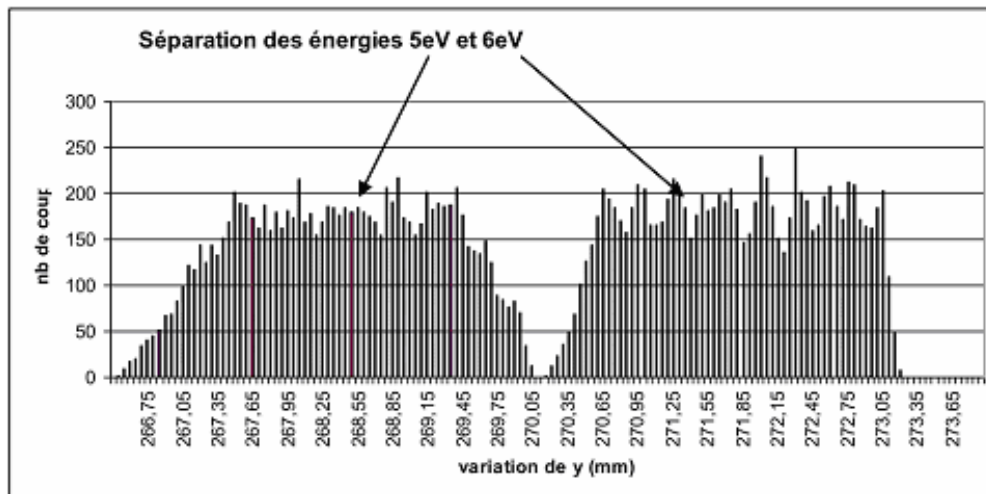


Figure IV-40 : Distribution de la position d'arrivée de particules lancées à l'entrée de l'optique d'accélération avec deux énergies différentes, 5 et 6 eV.

Comme illustré sur la Figure IV-40, la résolution en énergie est significativement meilleure que 1 eV, conformément à nos besoins. La résolution en énergie de l'instrument se détermine à partir des résultats de la Figure IV-40. La distribution des impacts sur le détecteur correspond grossièrement à une gaussienne tronquée (avec un plateau). Pour définir si il y a bien séparation de deux paquets d'impacts (ici correspondant à deux groupes de particules injectées avec 1 eV d'écart), il faut donc estimer pour chaque énergie le nombre d'impacts qui sont dans la zone de recouvrement des deux groupes d'impact. Nous adaptons une fonction gaussienne tronquée sur chaque énergie. Pour le cas de la Figure IV-40, et pour chaque énergie, le nombre d'impacts « indécis » est $< 1\%$ du nombre total d'impacts donc on peut séparer deux énergies de 5 eV et 6 eV avec une résolution meilleure que 1% ce qui nous permet de conclure que la résolution est d'au moins 1 eV à 5 eV soit $\Delta E/E \sim 0.2$ à 1% pour utiliser une formulation classique en spectrométrie. L'estimation de la résolution en masse se fait selon le même principe. Pour ce qui est de l'énergie, 1% est un seuil très faible lorsque l'on fait des mesures de fonction de distribution en énergie et que l'on retient en général un seuil plus élevé d'au moins 10%. La raison est que, contrairement aux mesures de masse qui permettent l'identification des espèces, on ne cherche pas de pics dans une distribution de ce type mais on vise simplement à déterminer la forme du spectre. La précision des paramètres qui décrivent le spectre dépend bien sûr de la résolution de l'instrument mais aussi du bruit et du nombre de coups total. En général l'influence de ces derniers facteurs est telle que c'est la résolution en énergie à 10% qui est utile et qui permet donc de caractériser en pratique les performances effectives d'un instrument.

De la même manière, nous avons étudié la résolution en masse en lançant des particules de différentes masses à une énergie donnée. La Figure IV-41 montre la différence en temps de vol entre l'entrée du réflectron et l'arrivée sur le détecteur. L'énergie des particules est de 5 eV pour ce test.

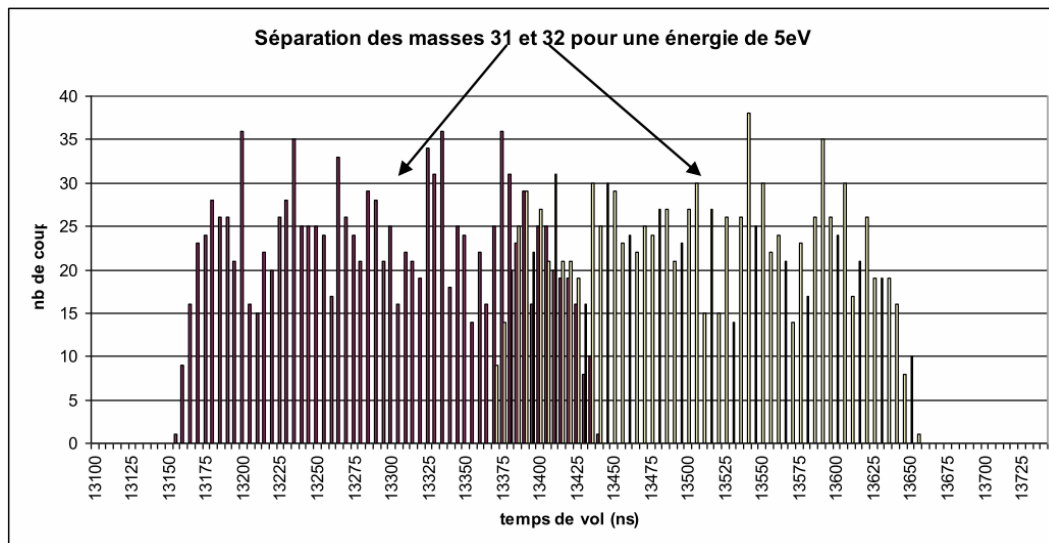


Figure IV-41 : Distribution des temps de vol de particules lancées à l'entrée de l'optique d'accélération avec une énergie de 5eV et des masses de 31 et 32.

La séparation des masses 31 et 32 montrée sur la Figure IV-41 est obtenue à partir de la mesure de temps de vol des particules des deux masses entre le déflecteur et le détecteur. Ce résultat ne prend pas en compte la variation du potentiel déflecteur nécessaire pour la détermination du temps "start" de l'analyseur temps de vol. Dans le cas où nous utiliserions la position de l'impact sur le détecteur pour connaître le temps "start" de la particule, la résolution serait dégradée. Pour obtenir une bonne résolution, il va falloir réduire la tache de focalisation sur le détecteur selon l'axe des masses.

La Figure IV-42 a été obtenue en utilisant le mode déflecteur de l'électrode d'entrée du réflectron. Afin que ce mode fonctionne, il faut aussi nous assurer que la déflexion n'étale pas trop la zone d'impact afin de rester confiné à la zone du détecteur, ni que la taille de la zone impactée ne change par l'impact de la déflexion (en relation avec la résolution en temps de vol).

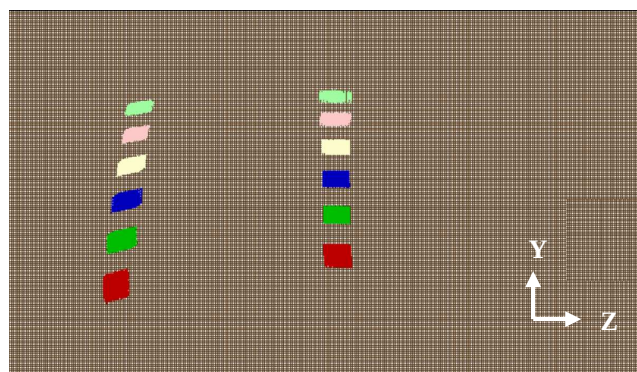
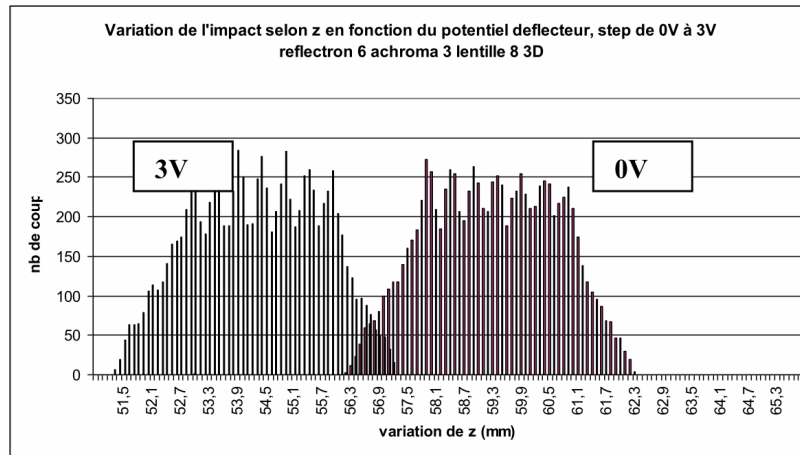
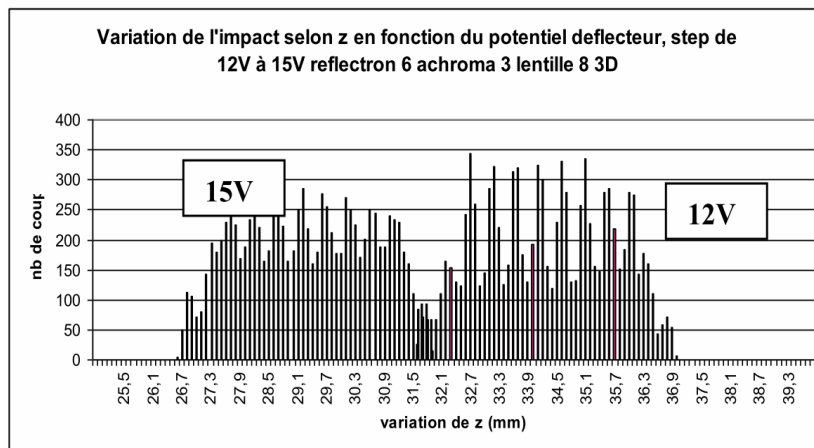


Figure IV-42 : Impacts sur le détecteur dans le plan YZ. Les différentes couleurs correspondent à différentes énergies, de 5 à 15eV par pas de 2eV. Les groupes de taches sont liés aux deux déflexions imposées à l'entrée du réflectron.

La Figure IV-43, montre la taille de la zone impactée pour deux valeurs du potentiel déflecteur. La taille moyenne de chaque zone impactée est de 5 mm.



a.



b.

Figure IV-43 : a. Distribution spatiale des impacts suivant l'axe Z du détecteur pour deux valeurs de potentiel du déflecteur, 0V et 3V. b. Distribution spatiale des impacts suivant l'axe Z du détecteur pour deux valeurs de potentiel du déflecteur, 12V et 15V.

Comme prouvé sur la Figure IV-43, une différence de déflexion de 3V à l'entrée du réflectron suffit pour séparer complètement les impacts à la surface du détecteur suivant l'axe Z. Cette résolution est vraie quelle que soit l'intensité du potentiel déflecteur. Le maximum de variation du potentiel attendu est de 60V puisqu'il correspond à une excursion de la tache à la surface du détecteur de 40 mm qui est la taille nominale de ce dernier.

La variation du potentiel du déflecteur se fait de manière linéaire avec un temps de montée de 14 μ s. Ce temps a été défini pour permettre aux particules les plus lourdes d'atteindre le détecteur sans se confondre avec la montée de potentiel suivante (voir section 2.3.3. du chapitre IV).

La Figure IV-44 montre la variation du temps de vol en fonction de la masse des particules pour le cas du prototype. Ce temps correspond à la distance entre le déflecteur et le détecteur. Le temps de montée du déflecteur dépendra du temps de vol de la particule la plus lourde. Dans notre cas, une particule de masse 32 représente le maximum. Le temps de montée du potentiel sera donc de 14 μ s correspondant au temps le plus court.

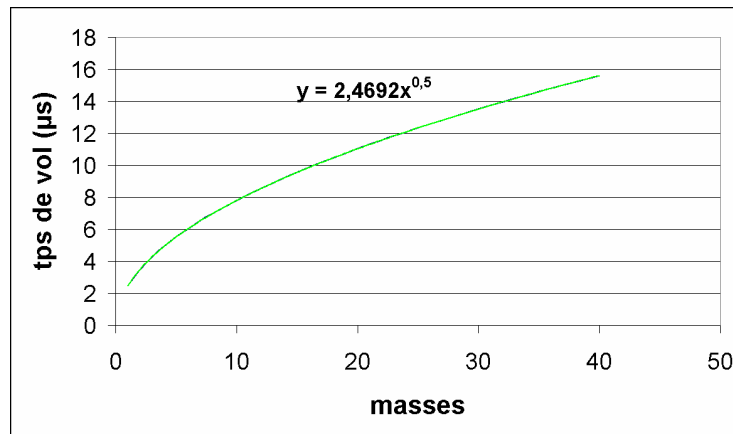


Figure IV-44 : Courbe de variation du temps de vol en fonction de la masse. Ce temps correspond à la distance entre le déflecteur et le détecteur, calculé à partir du modèle de simulation du prototype de NIMEIS pour des particule de 5eV.

Le prototype fait 80mm selon l'axe Z. Pour une déviation de 40mm, il faut appliquer un potentiel de 60V pour dévier à 40mm depuis le centre de l'instrument. La variation du potentiel se fait alors de +20V à -100V, sachant que le potentiel nominale est de -40V.

La solution présentée précédemment est nominale pour nos besoins. Cependant, il existe plusieurs pistes possibles d'amélioration du concept numérique. L'augmentation de l'acceptance à l'entrée de l'instrument (en sortie de la source d'ionisation) est en particulier recherchée car elle permet d'augmenter d'autant la sensibilité de notre instrument. La Figure IV-45 montre la séparation en énergie d'un tir ayant une ouverture de 20° et une aberration de 10° (soit deux fois l'ouverture utilisée pour les autres figures). Avec une telle ouverture angulaire, nous dégradons la résolution en énergie comme montré sur la Figure IV-45. De la même manière, la résolution en masse est également dégradée. Des solutions pour améliorer cette résolution sont possibles en diaphragmant le faisceau, c'est-à-dire, en filtrant les particules dont la trajectoire est la plus éloignée de la trajectoire moyenne des particules. Plusieurs solutions de diaphragme placé dans l'optique de focalisation ont été testées et ont montré qu'ils améliorent sensiblement les performances de l'instrument (voir section 2.4.1.2. du chapitre IV). Ce travail nécessite une approche systématique de modélisation de l'optique électrostatique et sera réalisé en même temps que les tests sur le prototype.

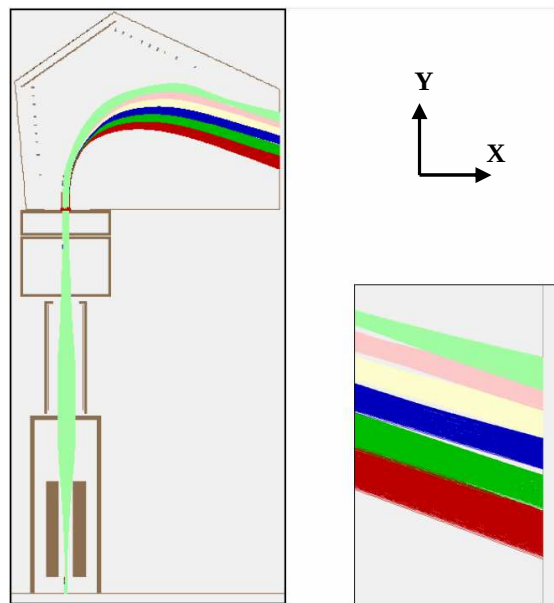
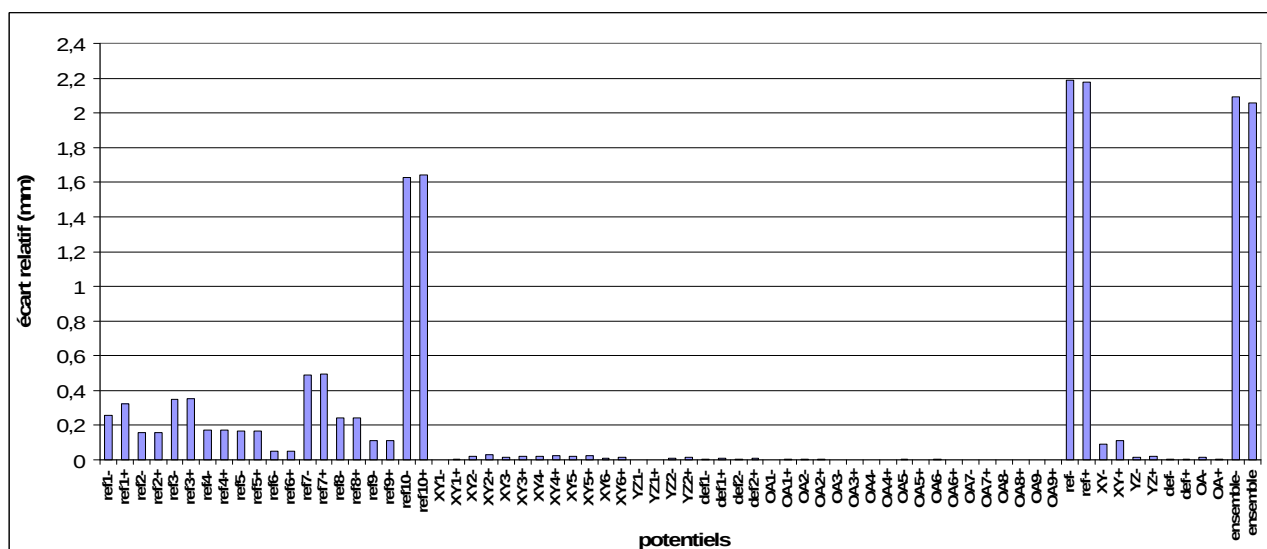
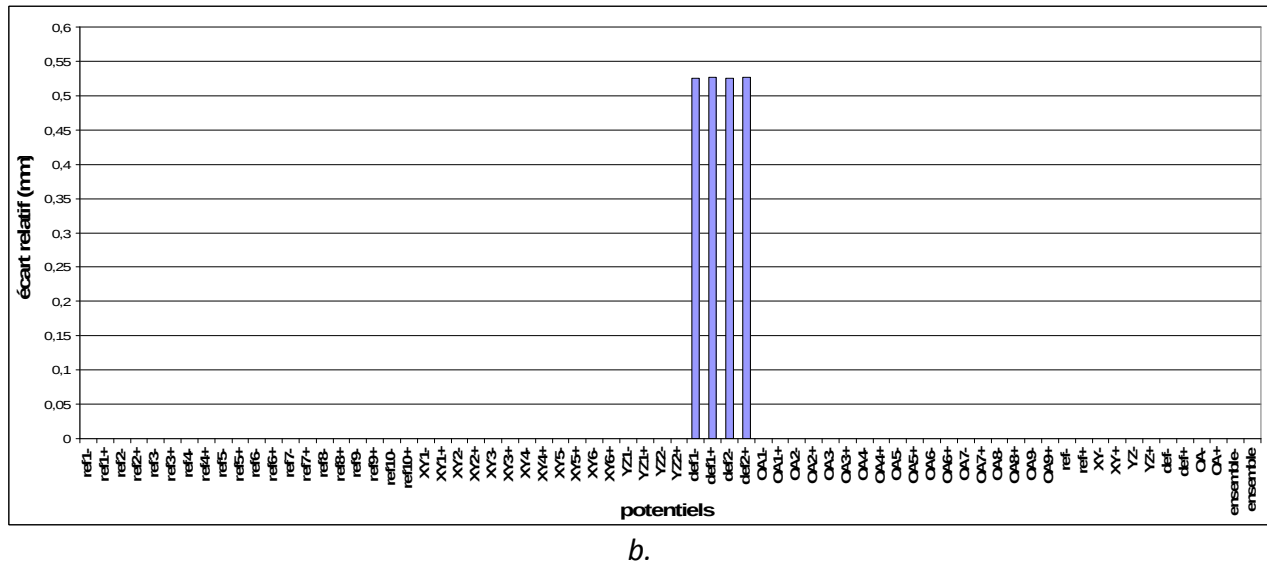


Figure IV-45 : Simulations de la trajectoire de particules lancées à l'entrée de l'optique d'accélération avec une ouverture angulaire de 20° et une aberration de 10° (contrairement au 10° et 5° des résultats montrés sur les figures précédentes). Les différentes couleurs correspondent à des gammes d'énergie allant de 5 à 15eV par paquet de 2eV. La figure de droite représente un zoom de la zone d'impact sur le détecteur.

Une étude est aussi réalisée sur la stabilité des performances de l'instrument en fonction de la précision nécessaire sur le potentiel de chaque électrode de l'instrument. Une variation de $\pm 5\%$ en Volt est choisie pour réaliser cette étude. Un tir à 5eV est réalisé et la variation de la position du point d'impact selon l'axe des énergies et des masses est calculée.



a.



b.

Figure IV-46 : Observation de la variation de la position d'impact sur le détecteur en fonction de la variation des potentiels de l'optique. La légende est donnée par : refl pour réflectron, XY pour la lentille XY, YZ la lentille YZ, def le déflecteur, OA l'optique d'accélération et ensemble tous les potentiels de l'optique. Refl1- correspond à une variation négative du potentiel du réflectron par rapport au potentiel nominal de l'électrode 20 de la Figure IV-38, refl10+ à une variation positive du potentiel par rapport au potentiel nominal de l'électrode 29, XY1 à l'électrode 10, OA1 à l'électrode 1 de la Figure IV-38. Lorsqu'il n'y a pas de numéro, cela correspond à tous les potentiels de l'optique citée. a. Variation de la position relative sur le détecteur selon l'axe des énergies des impacts pour un tir à 5eV en fonction d'un changement du potentiel de +/-5% pour chaque électrode de l'instrument. b. Variation de la position relative sur le détecteur selon l'axe des masses des impacts pour un tir à 5eV en fonction du changement du potentiel de +/-5% pour chaque électrode de l'instrument.

La Figure IV-46-a montre qu'une variation maximale de 2mm selon l'axe des énergies est constatée lorsque le potentiel de l'électrode faisant office de miroir électrostatique dans le réflectron varie de +/-5% autour de sa valeur nominale. De la même manière, une variation de 0.5mm selon l'axe des masses correspond à une variation de +/-5% sur le potentiel du déflecteur, illustrant les conséquences d'un fonctionnement dissymétrique de cette lentille. En termes de résolution en énergie, une variation de 2mm correspond à un décalage en énergie de $\sim 0.5\text{eV}$. Comme montré sur la Figure IV-46, les performances de l'instrument sont relativement bien conservées dans le cas d'une incertitude de +/-5% sur le potentiel des électrodes de l'optique. La résolution en énergie est la plus sensible à de telles variantes mais seulement pour certaines électrodes. Ce résultat dénote le fait que certaines électrodes devront être alimentées indépendamment des autres afin de pouvoir les contrôler au mieux.

2.4. Applications et Perspectives

2.4.1. Appel d'offre de la mission JUICE

2.4.1.1.Mission JUICE

La mission JUICE est une mission de l'ESA ayant pour objectif d'étudier le système de Jupiter avec ses quatre satellites galiléens (Europe, Callisto, Io et Ganymède). La sonde sera lancée en 2022 pour une arrivée sur l'orbite de Jupiter en 2030. Elle naviguera dans le système de Jupiter avant de se mettre en orbite autour de Ganymède. Cette orbite permettra d'étudier la magnétosphère de Jupiter et l'interaction du plasma jovien avec ses satellites. NIMEIS a été proposé dans le cadre d'un consortium, JuMMP (Jupiter Moon and Magnetospheric Plasma) dont le PI est A. Coates du MSSL (Mullard Space Science Laboratory) en Angleterre.

Une proposition de l'instrument composé de la source d'ionisation basée sur l'utilisation de nanotubes de carbone n'étant pas encore possible, le choix a été porté sur l'optimisation de l'instrument avec une source venant d'un autre instrument : STROFIO.

2.4.1.2.Couplage de l'optique de NIMEIS avec la source de STROFIO

Pour cet appel d'offre, il nous a été proposé d'utiliser la source d'ionisation de l'instrument STROFIO (voir section 4.2.1 du chapitre III). Une optimisation de l'assemblage est faite de manière à obtenir de bons résultats sur le détecteur. De nouveaux critères d'optimisations sont déterminés pour ce modèle. Une résolution $<0.5\text{eV}$ est souhaitée sur la bande d'énergie 0.5eV - 2eV avec une exclusion des particules ayant une énergie $<0.1\text{eV}$ sur le détecteur. Cette dernière condition vient de l'étude réalisée sur l'atmosphère résiduelle créée par le satellite (voir section 4.3 du chapitre III) ainsi que de la simulation numérique de la distribution en énergie des particules attendues dans l'environnement de Ganymède (voir section 2.5 du chapitre IV). Les particules du gaz résiduel ont des énergies inférieures à 0.05eV dans le repère du satellite tandis que les particules exosphériques ont des énergies supérieures à 0.5eV dues à la vitesse du satellite. Un modèle numérique de la source de STROFIO est couplé à l'entrée du modèle numérique de NIMEIS. Des ions sont créés aléatoirement dans le volume d'ionisation avec des énergies respectives de 0.05eV (représenté par les tracés noirs sur la *Figure IV-47.b*), 0.5eV (tracés rouges) et 2eV (tracés verts) sur une surface de 1cm de diamètre et une épaisseur de 2mm , ce qui correspond au volume d'ionisation. Quatre diaphragmes sont également placés à différents endroits de l'instrument pour empêcher les particules du gaz résiduel d'atteindre le détecteur. Un premier diaphragme de 15mm de diamètre est placé à l'interface de l'optique d'accélération et la lentille XY. Un deuxième, de 10mm de diamètre, est placé à l'interface des lentilles XY et YZ. Un troisième, de 10mm de diamètre, est placé à l'interface de la lentille YZ et le déflecteur. Le quatrième diaphragme, de 4mm de diamètre, est placé à l'entrée du réflectron. La mise en place de ces diaphragmes est montré sur la *Figure IV-47.a*.

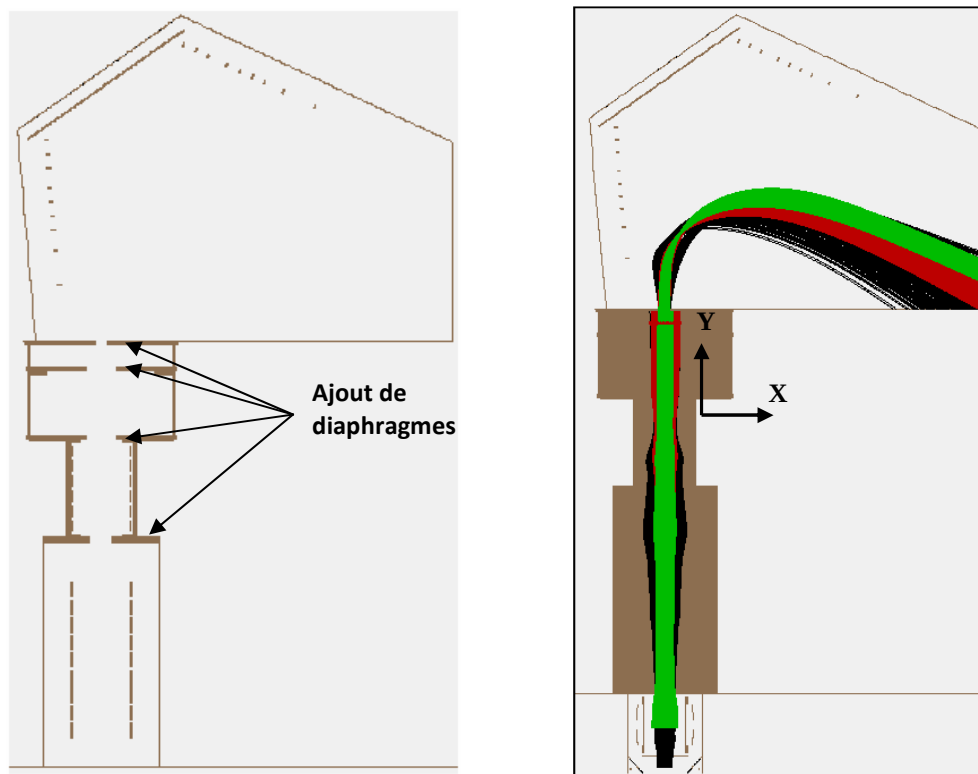


Figure IV-47 : a. Vue en coupe du modèle d'optimisation où des diaphragmes ont été ajoutés. b. Résultat d'optimisation de l'assemblage STROFIO/NIMEIS. Particules de 0.05eV (noir), 0.5eV (rouge) et 2eV (vert). Surface de 1cm de diamètre avec épaisseur de 2mm, 5000 particules de chaque énergie.

La Figure IV-48 montre la séparation des impacts sur le détecteur en fonction des énergies de 0.5eV et 2eV pour un nombre de coups normalisé. Il est possible de séparer les énergies de 0.5eV et 2eV tout en excluant les particules de faible énergie. Le taux d'impact de particules de 0.05eV est de 8.7%, de 45% pour une énergie de 0.5eV et de 76% pour une énergie de 2eV.

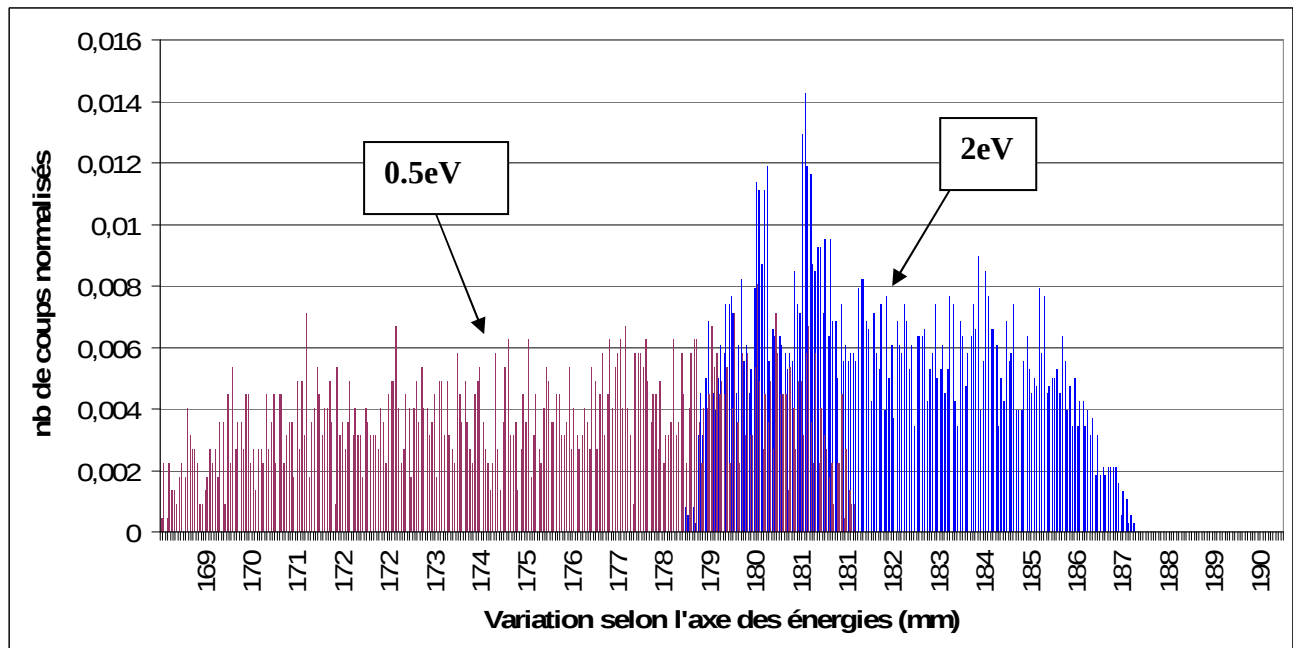


Figure IV-48 : Histogramme de séparation des énergies de 0.5eV et 2eV après optimisation des potentiels de l'optique de NIMEIS et du couplage de la source d'ionisation de STROFIO.

Cette optimisation rapide de l'optique montre que NIMEIS, grâce à ses propriétés de dispersion en énergie, permet de réduire d'un facteur de 10 au moins le flux de particules résiduel circulant autour du satellite, en évitant de mesurer les particules dont l'énergie est inférieure à 0.5eV, constituant le gaz résiduel.

2.4.2. Modélisations futures et améliorations du prototype de NIMEIS

Une nouvelle optimisation numérique de l'instrument peut-être réalisée en enlevant les lentilles XY et YZ. En effet, il a été constaté que le modèle numérique de l'instrument pouvait fonctionner sans ses lentilles. En raccourcissant le chemin optique, l'optique d'accélération peut suffire pour focaliser le faisceau sur le détecteur dans les deux plans. La Figure IV-49 montre des résultats de simulation lorsque les lentilles ont été retirées du modèle numérique. Un tir avec une ouverture de 10° et une aberration angulaire de 5° en entrée de l'optique d'accélération avec une variation de l'énergie de 1eV à 11eV avec un pas de 2eV donne une focalisation sur le plan du détecteur avec une résolution en énergie inférieure à 1eV. Les potentiels de l'optique d'accélération et du réflectron restent inchangés par rapport au modèle du prototype. La taille de la tache le long de l'axe des masse (axe Z) montrée Figure IV-49.b est acceptable pour donner une estimation de la masse. Ce modèle donne une résolution en masse supérieure à 30 pour le cas d'une énergie de 1eV.

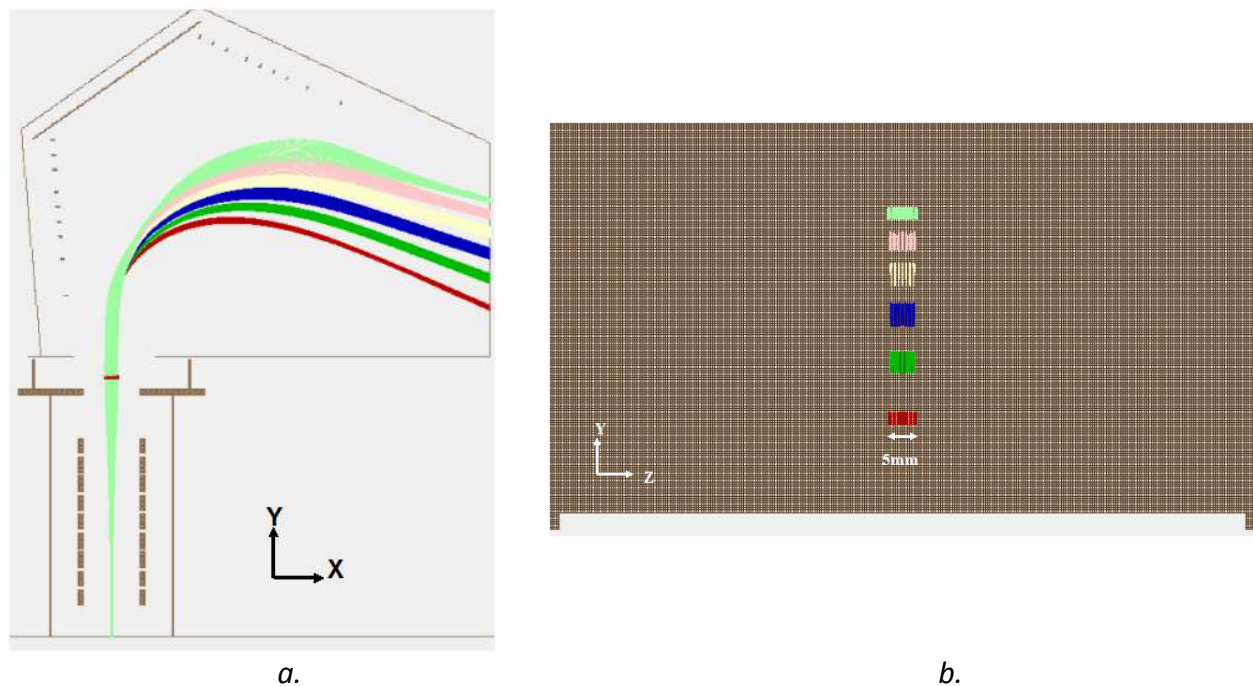


Figure IV-49 : Résultats de simulation pour un modèle où les lentilles XY et YZ ont été retirées. Un tir à l'entrée de l'optique d'accélération d'une ouverture de 10° avec une aberration angulaire de 5° . Une variation des énergies de 1eV à 11eV avec un pas de 2eV. a. Vue dans le plan XY b. Vue dans le plan YZ à l'emplacement du détecteur. Une résolution en énergie inférieure à 1eV est obtenue.

Une amélioration du design du réflectron est envisageable à partir des résultats des tests du prototype. Ces changements ont été suggérés par les premiers tests sur le prototype. Ils doivent cependant être confirmés par de plus amples modélisations, notamment en intégrant les contraintes de la source d'ionisation.

2.5.Simulation de la mesure :

Un modèle de simulation exosphérique englobant un maximum d'interactions permet de mieux comprendre les réactions mises en jeu, les processus majoritaires, les énergies libérées ou encore les densités du milieu. Cette simulation repose sur l'utilisation d'un modèle 3D Monte Carlo qui prend en compte toutes les interactions et réactions souhaitées. Principalement, les processus pris en compte sont les éjections, ionisations, échappements, réabsorptions.... L'objectif est ensuite de placer le modèle numérique de notre instrument dans ce modèle de l'exosphère en suivant l'orbite décrite par le satellite et de réaliser une simulation des particules atteignant le détecteur de l'instrument. Cet exercice donne une première approche du bon fonctionnement de l'instrument et permet de vérifier si la fonction de distribution reconstituée à partir des mesures de l'instrument est correcte et acceptable. Deux types de simulations sont décrits ici, le premier étant l'interaction de l'atmosphère de Mars avec le vent solaire et le deuxième l'interaction de Ganymède avec le plasma jovien.

2.5.1. Simulation dans l'exosphère de Mars

A partir d'un modèle 1D Monte-Carlo pour étudier l'effet des dissociations moléculaires sur le rendement du criblage de la thermosphère martienne, Leblanc and Johnson (2002) ont couplé ce modèle 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, potentiels d'interaction), et des distances caractéristiques (distances inter-atomiques, paramètres d'impact). Fabrice Cipriani a ensuite utilisé ce modèle pour placer NIMEIS dans l'exosphère martienne durant sa thèse en 2006. Le modèle de simulation est partagé en deux zones de la thermosphère : la première étant collisionnelle et allant de 110km à 400km d'altitude, la deuxième étant non-collisionnelle allant de 400km jusqu'à deux rayons martiens. Ce domaine de la thermosphère est constitué de trois espèces : O, CO, et CO₂, dont les densités et températures au minimum et maximum d'activités solaires sont données par le modèle de Kim et al. (1998) ou Krasnopolsky et al. (2002). Deux processus de formation sont pris en compte ; le criblage et la recombinaison dissociative. La Figure IV-50 donne les résultats de flux à l'entrée de NIMEIS pour deux directions de l'entrée par rapport au nadir (70° et 20°) en fonction de l'énergie des particules. Les deux processus sont différenciés sur le graphique. La mesure est réalisée pour l'oxygène.

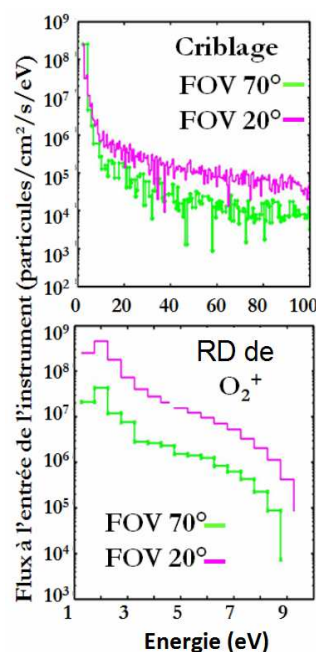


Figure IV-50 : Mesure de Flux à l'entrée de NIMEIS pour deux angles entre le nadir et l'instrument et deux types de processus, le criblage et la recombinaison dissociative pour la mesure de l'oxygène à une altitude de 400km. (Cipriani et al. 2007)

La Figure IV-50 montre que les énergies des particules des deux processus ne sont pas identiques. Pour la recombinaison dissociative, l'énergie maximale est de l'ordre de 9eV alors que dans le cas du criblage, l'énergie peut aller jusqu'à 100eV. La mesure de l'énergie peut donc donner une information sur le processus de formation de la particule. La direction de l'entrée de l'instrument par rapport au nadir est importante lorsque l'ouverture de l'instrument n'est pas grande, comme c'est le cas pour NIMEIS en comparant l'angle de 20° et 70° de la Figure IV-50.

2.5.2. Simulation dans l'exosphère de Ganymède

Développé par Turc et al. (2013), ce modèle de simulation tri-dimensionnel suit le modèle proposé par Marconi et al. (2007). Il est élaboré pour une espèce de molécules, H_2O et deux processus de formation, à savoir le criblage et la sublimation. La chimie ayant lieu dans l'exosphère est aussi ajoutée pour les composés de H_2O , à savoir H , H_2 , O , OH et O_2 , avec les réactions de photodissociation, les réactions par impact électronique et les interactions neutre-neutre. La mesure des neutres par NIMEIS dans le modèle de simulation de l'exosphère de Ganymède a été reconstituée dans le cadre de l'appel d'offre de la mission JUICE (voir section 2.4.1 du chapitre IV). Dans ce but, la source d'ionisation utilisée pour le calcul d'ions produits vient de l'instrument STROFIO (voir section 4.2.1 du chapitre III). La Figure IV-51 donne les profils de densités le long d'une orbite de JUICE autour de Ganymède pour une altitude de 500km (Figure IV-51.a) et 200km d'altitude (Figure IV-51.b).

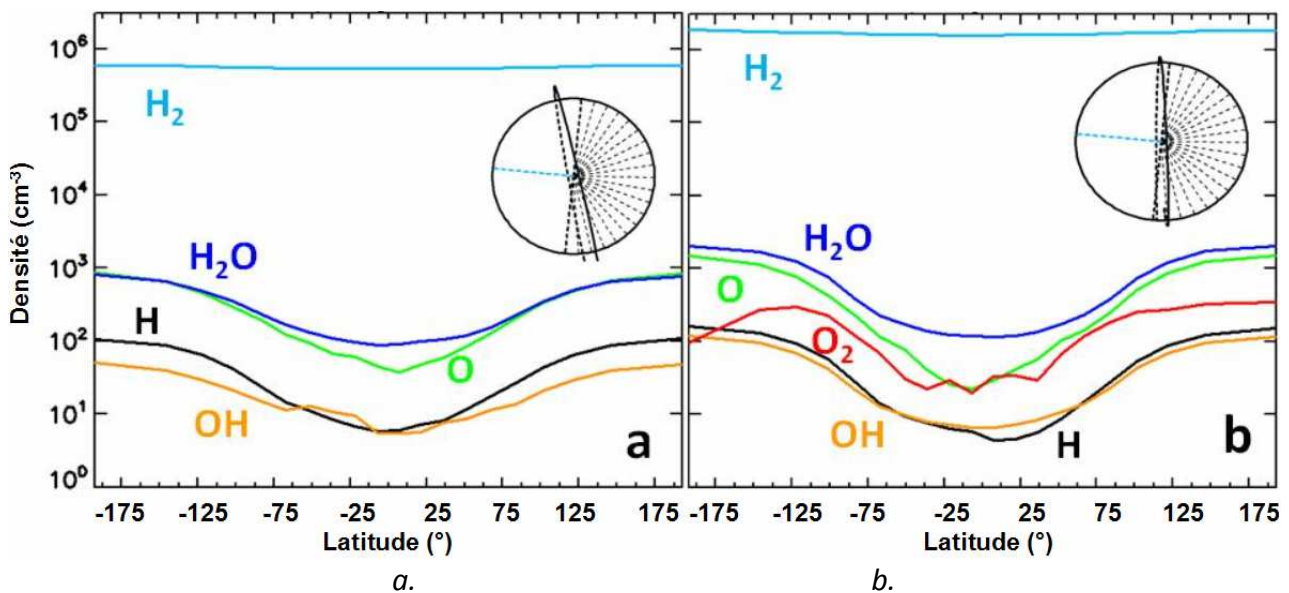


Figure IV-51 : Profils de densités le long de deux orbites de JUICE : a. durant la phase GCO500 du 13.4.2033 entre 9:40 et 10:45. b. durant la phase GCO200 du 16.6.2033 et 17.6.2033 entre 21:45 et 00:25. L'insert correspond à une vue depuis le Nord de la trace de JUICE autour de Ganymède. La ligne bleue représente le point subsolaire et la partie en pointillé de Ganymède correspond au côté nuit de Ganymède. L'angle de phase de Ganymède est de 275°.

Pour connaître la densité de particules atteignant le détecteur de NIMEIS, il faut aussi prendre en compte la probabilité d'ionisation des particules neutres dans la source d'ionisation ainsi que le champ de vue de NIMEIS dans l'espace des phases. La figure IV-52 présente le résultat d'une simulation du champ de vue de l'instrument NIMEIS au cours de deux orbites de la sonde JUICE autour de Ganymède.

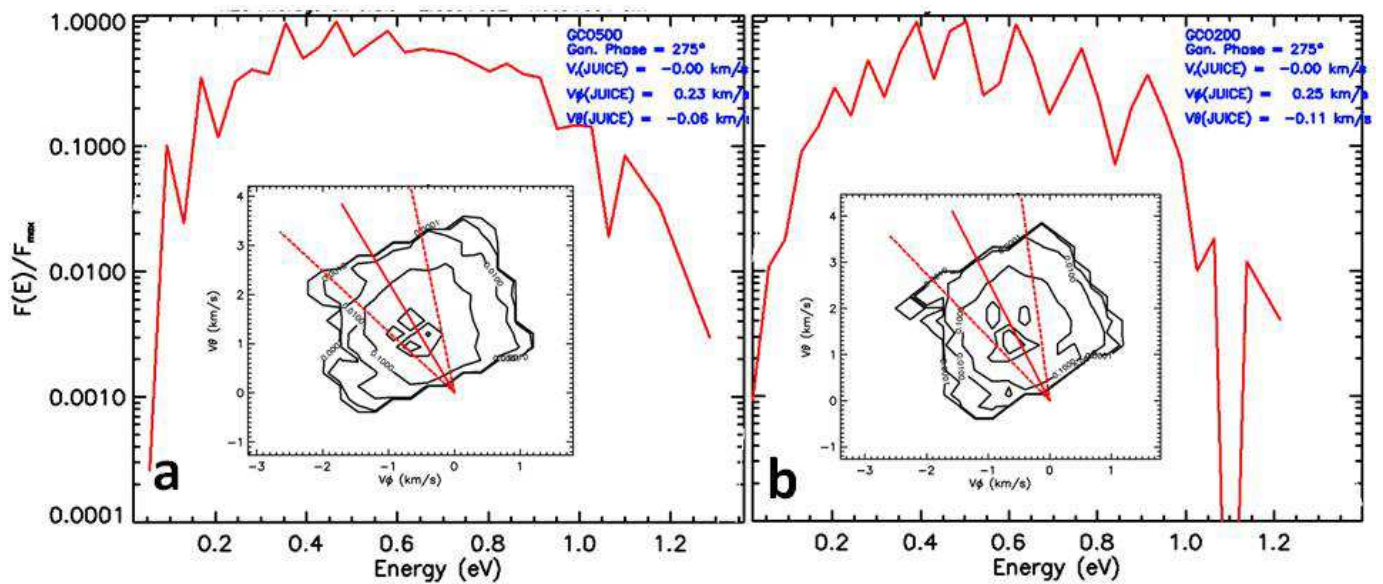


Figure IV-52 : Simulation de la distribution moyenne en énergie de H_2O (en nombre de particules/cm²/s/eV) le long de deux orbites de JUICE montrés Figure IV-51 mesurés par NIMEIS. a. durant la phase GCO500 du 13.4.2033 entre 9:40 et 10:45. b. durant la phase GCO200 du 16.6.2033 et 17.6.2033 entre 21:45 et 00:25. Les inserts montrent la distribution de vitesse de particules d' H_2O rencontrées par JUICE au-dessus du pôle Sud dans le plan des vitesses, latitude (axe y) et longitude (axe x). Les distributions de vitesse sont représentées dans le cadre de JUICE et le champ de vue de NIMEIS est représenté par les lignes rouges en pointillées.

La distribution en énergie des particules montrent un pic autour de 0.5 eV caractéristique de la population sublimée de la surface se déplaçant à la vitesse du satellite (dans le repère du satellite). La population d' H_2O éjectée depuis les pôles de Ganymède produit la queue au-delà de 0.5 eV. L'objectif de NIMEIS serait donc de pouvoir distinguer ces deux populations.

A partir des probabilités d'ionisation données section 2 du chapitre III et des résultats de la Figure IV-52, il est alors possible de reconstruire le flux d'ion qui entrera dans l'optique électrostatique de NIMEIS le long des orbites de JUICE décrit précédemment. La Figure IV-53 montre le flux de particules ionisées entrant dans l'optique de NIMEIS après avoir passé la source d'ionisation.

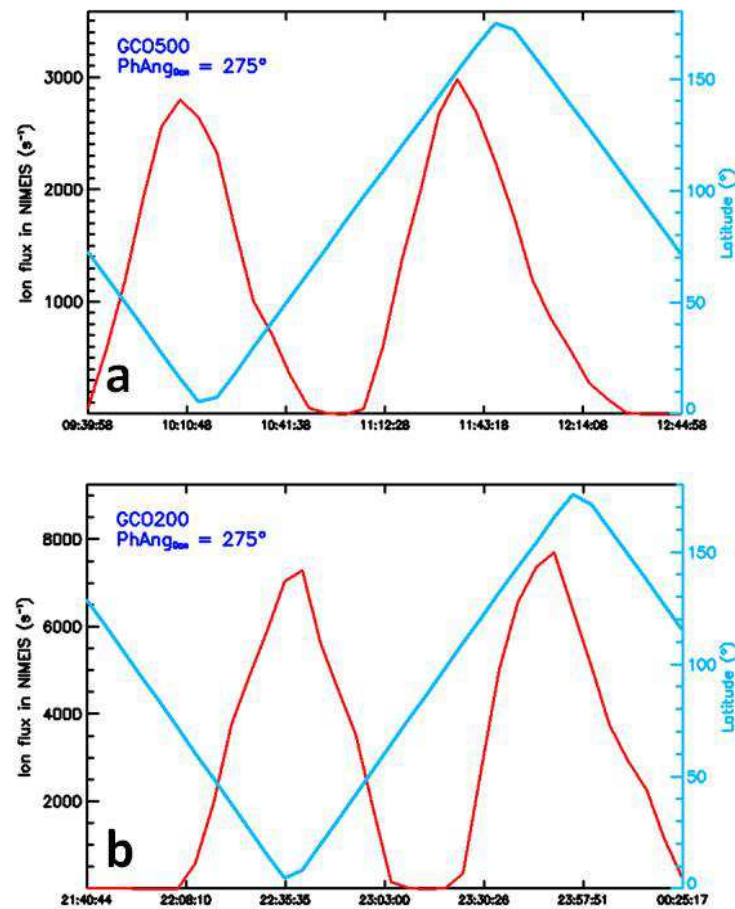


Figure IV-53 : Flux de particules entrant dans l'optique de NIMEIS après être passées à travers la source d'ionisation. a. durant la phase GCO500 du 13.4.2033 entre 9:40 et 10:45. b. durant la phase GCO200 du 16.6.2033 et 17.6.2033 entre 21:45 et 00:25. La ligne bleue représente la latitude de JUICE. Les pics de flux sont attendus au-dessus des pôles en accord, avec la Figure IV-51 . Les minima correspondent à des densités minimales.

D'après nos calculs, nous devrions pouvoir mesurer avec un bon signal sur bruit (essentiellement dû aux radiations) les principaux composants de l'exosphère de Ganymède (en particulier H₂O). Ce calcul a été fait en considérant l'efficacité de la source de STROFIO et un blindage optimisée afin de réduire la composante bruitée (blindage actif). Les résultats de la figure IV 53 ont été obtenus en prenant en compte le champ de vue de l'instrument qui est défavorable au niveau de l'équateur (minimum sur la figure) ce qui induit une réduction d'un facteur 10 de la densité « vue » par l'instrument dans ces portions de l'orbite.

2.6.Résumé

Le modèle numérique de l'instrument a permis de démontrer qu'il était possible de réaliser une optique capable de mesurer une distribution en énergie instantanément sur une bande passante définie. Il a été prouvé aussi qu'une analyse en masse était possible à partir de cette distribution en énergie tout en assurant un cycle de mesure continu. L'utilisation d'algorithmes génétiques afin d'optimiser l'optique ainsi que le logiciel SIMION[®] nécessaire pour définir l'optique électrostatique ont permis d'obtenir le modèle numérique de NIMEIS. La particularité de réaliser une distribution en énergie et une analyse en masse simultanément à partir d'une seule optique fait de NIMEIS un instrument simple et compact.

Il n'y a pas de grilles dans l'instrument entre la sortie de la source d'ionisation et le détecteur. Le flux de particules sur le détecteur donne alors une transparence de 100%. La géométrie de la future source d'ionisation (section 4 du chapitre IV), déterminera le facteur géométrique de l'instrument. Le tableau suivant résume les performances de l'instrument qui ont été déterminées par le modèle numérique.

Masse $\Delta M/M$	Energie $\Delta E/E$	Champ de vue	Cycle de mesure	Transparence depuis la sortie de la source d'ionisation
<30	~0.5 sur 0-10eV	15°	95%	100%

Tableau 8 : Performances de NIMEIS déterminées par le modèle numérique.

A noter que ces performances ont été établies sans source d'ionisation. Le rajout d'une source d'ionisation permet de déterminer le facteur géométrique de l'instrument, dont la transparence ne sera plus de 100% car tous les ions formés dans la source ne peuvent entrer dans l'instrument.

L'appel d'offre de la mission JUICE a permis de constater le fait que le couplage de NIMEIS avec la source d'ionisation provenant de l'instrument STROFIO dans un modèle numérique donne des résultats acceptables. L'ajout de diaphragmes entre les interfaces des différentes optiques permet d'éviter que les particules de faible énergie (<0.1eV) venant du dégazage résiduel du satellite et du dégazage du filament n'atteignent le détecteur (section 4.3 du chapitre III et section 2.4.1.2 du chapitre IV).

La réduction du chemin optique entre l'optique d'accélération et le réflectron permet d'obtenir une focalisation en énergie avec une résolution inférieure à 1eV sur une gamme de 1eV à 11eV par pas de 2eV et une résolution en masse de 30 à 1eV par simulation (sans utilisation du déflecteur). Cette amélioration du modèle permettra de réduire la taille et le poids de NIMEIS, tout en gardant les mêmes propriétés, ce qui est très avantageux dans le domaine spatial.

La simulation de la mesure, à l'aide de modèles d'environnement planétaire de type Monte-Carlo 3D, nous permet de vérifier le fonctionnement de l'instrument dans le milieu à étudier, à savoir si les performances de l'instrument suffisent pour reconstruire la fonction de distribution à partir des mesures obtenues sur le détecteur de l'instrument.

3. Réalisation du Prototype de laboratoire et mesures initiales

A partir du modèle de simulation décrit dans la section précédente, un modèle mécanique a été défini, permettant de vérifier et de confirmer les résultats obtenus par simulation. Le modèle numérique obtenu dans la section 2 du chapitre IV est composé de l'optique d'accélération et de focalisation, des lentilles XY et YZ, de l'électrode de déflexion et du réflectron. Il manque encore la source d'ionisation et le détecteur. Cette partie, traitant du modèle mécanique, englobe ces deux éléments qui font l'objet d'une description détaillée. La source d'ionisation utilisée pour les tests du prototype vient de l'instrument PALOMA (voir section 3.2.1 du chapitre IV) dont l'interface a été adaptée de manière à obtenir les conditions d'entrée du modèle numérique. Le détecteur a été développé au sein du laboratoire par une équipe d'électroniciens et du dessinateur mécanicien (voir section 3.3 du chapitre IV). Le principe vient de l'instrument PICAM (voir section 3 du chapitre V). Un modèle numérique complet de la source d'ionisation de PALOMA est également développé dans le but de comprendre les résultats obtenus à partir des tests réalisés sur le prototype de cette source.

La Figure IV-54.a représente le modèle mécanique comprenant tous les éléments de l'instrument ainsi que les colonnes de fixation à la chambre d'essai. L'une des électrodes de bord a été enlevée afin de voir l'intérieur du réflectron. La Figure IV-54.b montre une photo du prototype assemblé avant l'intégration dans le caisson à vide.

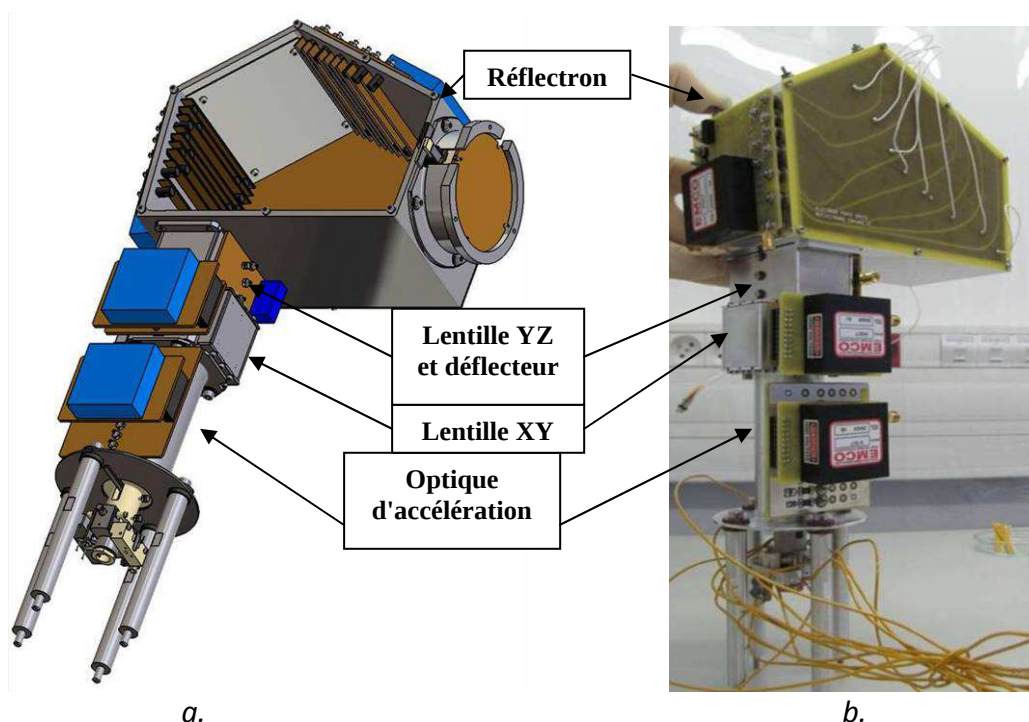


Figure IV-54 : a. Modèle 3D de l'instrument avec la source d'ionisation de PALOMA sur le bas de la figure entourée des colonnes de fixation. b. Photo du prototype de l'instrument NIMEIS avant intégration dans le caisson à vide.

Comme expliqué dans la section précédente, les particules subissent une accélération de 40V à partir de l'optique d'accélération et de focalisation. Cela veut dire que tous les éléments se trouvant après cette optique, à savoir les lentilles, le déflecteur, le réflectron et le détecteur sont portés à un potentiel de -40V. Dans ce but, l'instrument est fixé au caisson à vide par les 4 colonnes visibles sur la *Figure IV-54* isolées du reste de l'instrument. L'instrument, à partir de la sortie de la source d'ionisation, est à un potentiel dit "flottant" à -40V et indépendant de la chambre d'essai.

3.1.Modèle mécanique de l'optique obtenu à partir du modèle numérique

Tous les éléments conducteurs de l'instrument sont en aluminium. Les pièces isolantes sont en ultem ou en PEEK. L'alimentation des électrodes se fait à partir d'un convertisseur DC/DC fixé sur un PCB (Print Circuit Board) lui même fixé sur chaque optique. L'alimentation est de 12V pour chaque convertisseur DC/DC.

3.1.1. Optique d'accélération.

Les électrodes de l'optique d'accélération ont la forme d'anneaux en aluminium qui sont empilés dans un cylindre à -40V. Les anneaux sont isolés du cylindre par des pièces en ultem. A noter que le logiciel SIMION® ne permet pas de simuler des pièces isolantes comme de l'ultem. De ce fait, il faut faire attention à ne pas mettre trop d'isolant et veiller à ce qu'ils ne soit pas trop proche du faisceau de particules car l'isolant pourrait se charger. La *Figure IV-55* montre deux vues de l'optique d'accélération à partir des plans de fabrication du prototype de l'instrument NIMEIS. Les différentes couleurs correspondent à des sous-ensemble du montage permettant d'aider le lecteur.

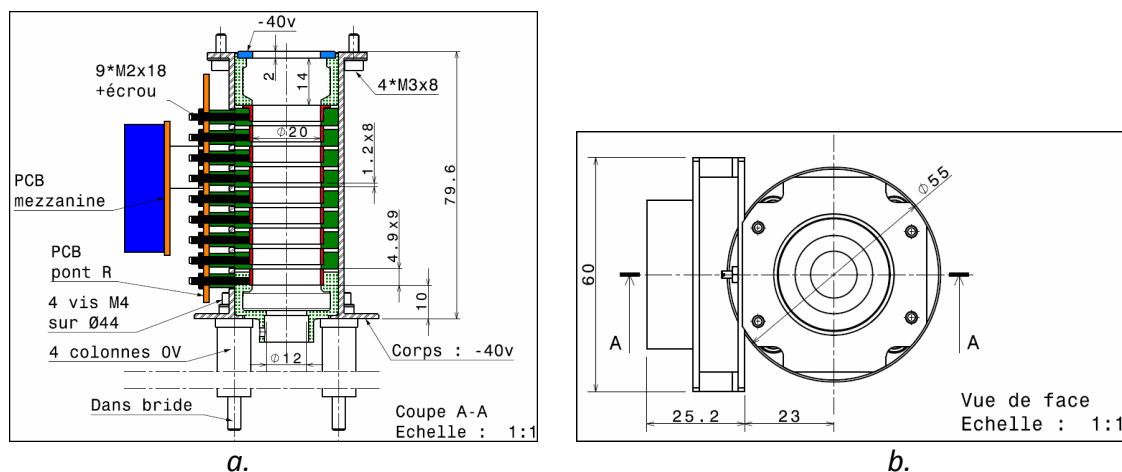


Figure IV-55 : a. Vue en coupe de l'optique d'accélération avec les cotations. b. Vue du dessus, optique cylindrique et le circuit imprimé équipé d'un convertisseur DC/DC pour alimenter les électrodes..

3.1.2. Lentille XY.

La lentille XY est une boîte dans laquelle, sont placées se trouvent 12 électrodes sous forme de barres en aluminium polarisées symétriquement deux à deux. La *Figure IV-56* représente une vue en coupe et une vue de face de la lentille.

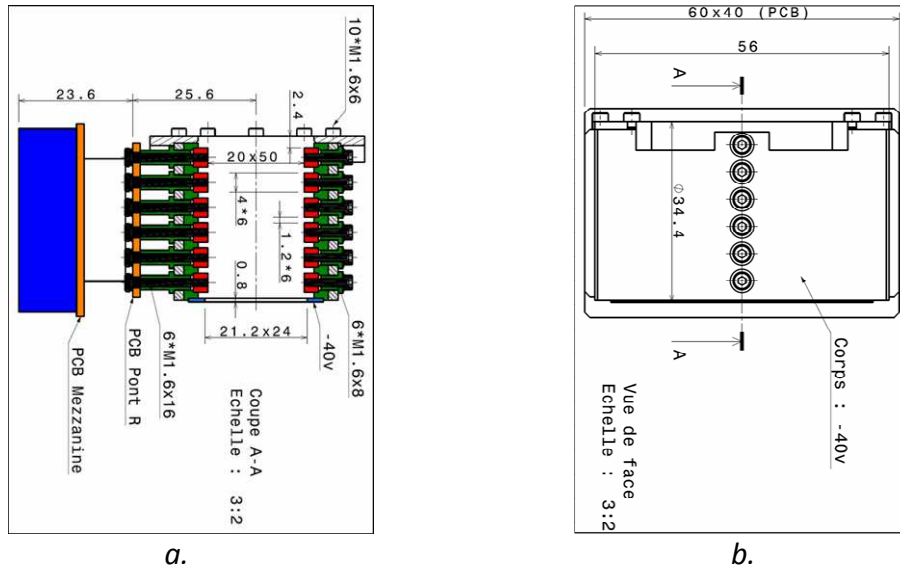


Figure IV-56 : a. Vue en coupe de la lentille XY avec les cotations. b. Vue de face avec la longueur selon l'axe Z.

3.1.3. Lentille YZ et déflecteur

La lentille YZ et le déflecteur font partie du même élément car ceux-ci se trouvent dans le même plan. La lentille YZ, contrairement à la lentille XY, ne possède que quatre électrodes sous forme de barres en aluminium polarisées symétriquement deux à deux. L'optimisation de cette lentille étant moins primordial, le design en est simplifié. Le déflecteur est composé de deux électrodes sous forme de barres en aluminium qui sont polarisées indépendamment l'une de l'autre mais dont la variation est antisymétrique par rapport au potentiel nominal de -40V. Les deux optiques sont séparées par une interface à -40V. La *Figure IV-57* montre cet élément en coupe et de face.

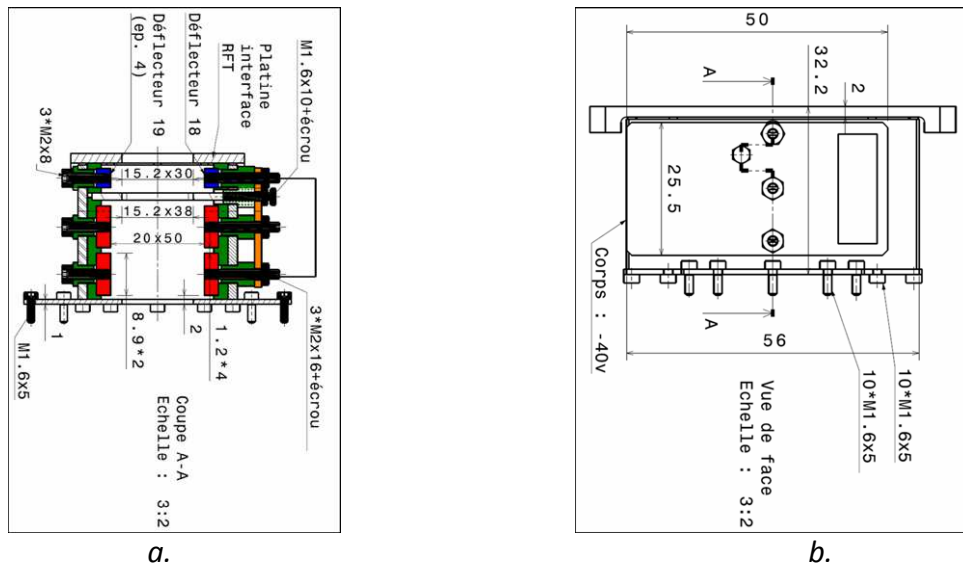


Figure IV-57 : a. Vue en coupe de la lentille YZ et le déflecteur avec les cotations. b. Vue de face avec la longueur de la lentille selon l'axe X. Cette lentille se trouve dans l'autre plan par rapport à la lentille XY.

3.1.4. Réflectron.

Le réflectron est composé de 21 électrodes polarisées symétriquement comme le montre la Figure IV-26 sous forme de barres en aluminium.

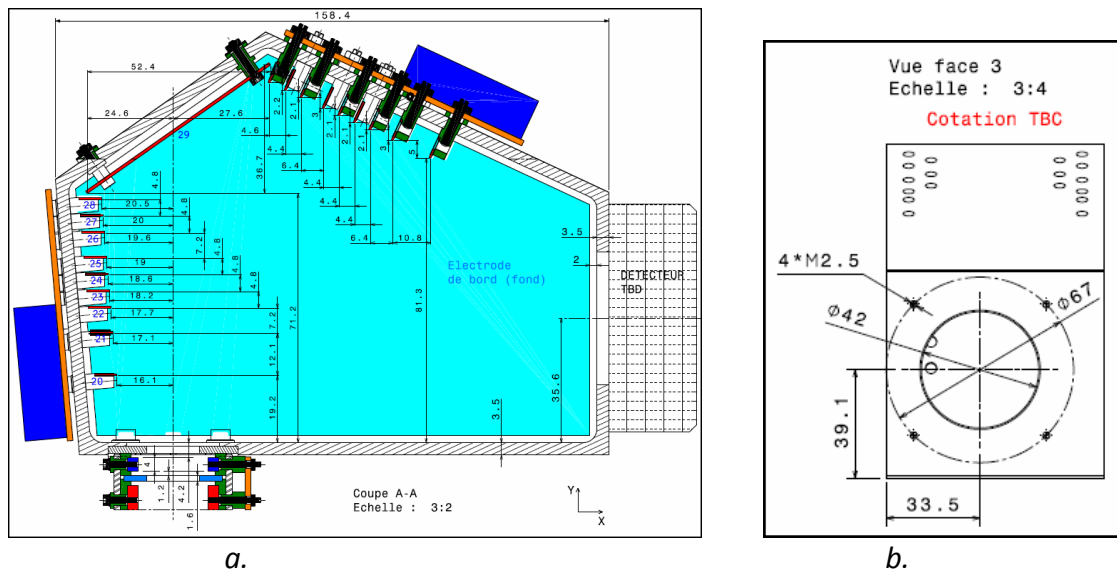


Figure IV-58 : a. Vue en coupe du réflectron avec les cotations. b. Vue de côté avec l'emplacement du détecteur et les cotations.

Pour le prototype, nous utilisons un détecteur circulaire car nous testons une déviation simplifiée du déflecteur, à savoir, un seul côté de déflexion. La dimension du réflectron selon l'axe des Z (masse) a été déterminée par la taille du caisson de mise sous vide. Cette dimension est de 80mm.

3.2. Source d'ionisation : héritage PALOMA

Afin de réaliser les tests sur le prototype, une source d'ionisation est indispensable. Il se trouve que nous disposons de l'instrument PALOMA dans notre laboratoire et qu'il a été possible d'utiliser la source d'ionisation de cet instrument.

3.2.1. L'instrument PALOMA

L'expérience PALOMA a été menée dans le cadre d'une action R&T visant à développer un instrument capable de mesurer les abondances isotopiques des gaz rares (Hélium, Néon, Argon, Krypton, Xénon) dans l'atmosphère de Mars. PALOMA est un spectromètre de masse neutre basé sur le principe du temps de vol s'appuyant sur l'utilisation d'un réflectron. La résolution en masse permet la séparation de deux isotopes voisins à $\sim 0.2\%$ en masse. La *Figure IV-59* suivante donne une vue en coupe de l'instrument.

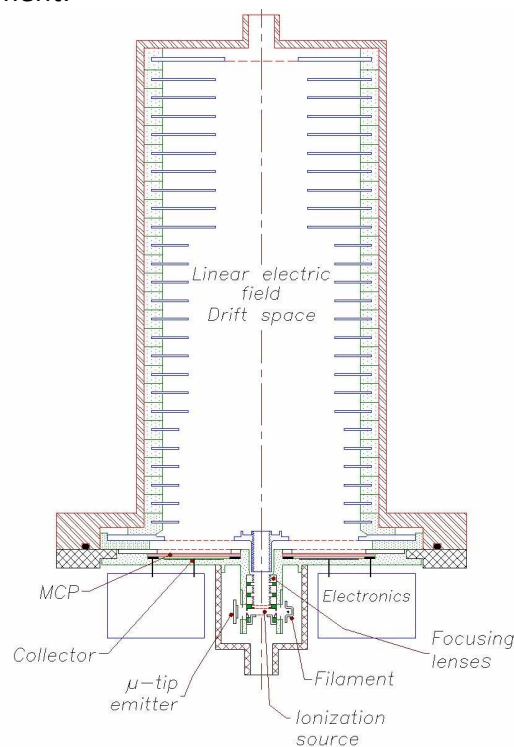


Figure IV-59 : Vue en coupe de l'instrument PALOMA.

La géométrie cylindrique du réflectron, composée de 26 électrodes sous forme d'anneaux dont la variation de potentiel est quadratique, permet d'atteindre une résolution en masse importante.

La source d'ionisation est basée sur le principe d'ionisation par bombardement électronique. Les électrons sont obtenus en chauffant un filament en tungstène rhénium puis accélérés et focalisés par une électrode vers le volume d'ionisation. L'énergie des électrons doit être de l'ordre de 100eV afin de maximiser la probabilité d'ionisation des particules comme le montre la *Figure IV-60* suivante.

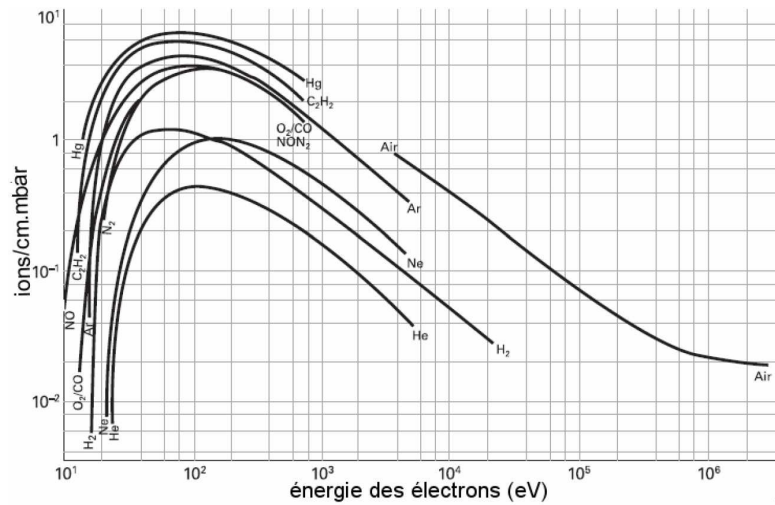


Figure IV-60 : Efficacité d'ionisation de différents gaz en fonction de l'énergie des électrons (thèse B. Sourd 2007).

Les ions formés sont stockés dans le volume d'ionisation puis envoyés dans le réflectron en étant focalisés. L'instrument fonctionne avec une source pulsée, augmentant ainsi la résolution en temps de vol de l'instrument.

3.2.2. Source d'ionisation

La première étape a consisté à étudier la source d'ionisation seule pour en connaître les caractéristiques. Connaissant les propriétés du faisceau à l'entrée de l'optique d'accélération (section 2.3.2 du chapitre IV), deux diaphragmes avec des diamètres de 2mm et 1mm espacés de 8.5mm à la suite des électrodes de focalisation permettent de s'approcher des conditions d'entrée dans l'optique d'accélération. La Figure IV-61 ci-après nous montre le montage de cette optique avec les différents éléments.

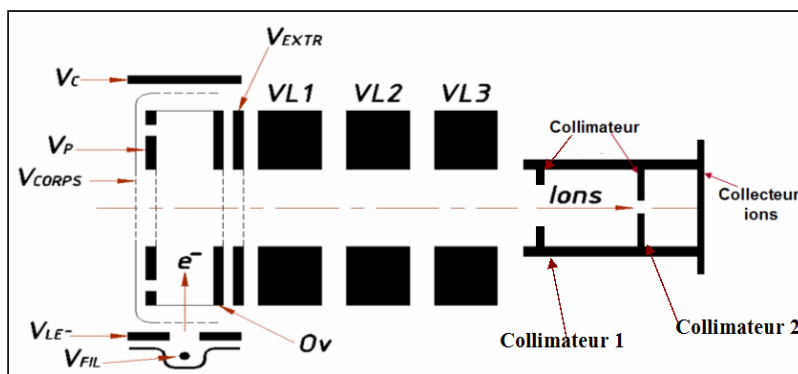


Figure IV-61 : Représentation de la source d'ionisation de l'instrument PALOMA.

La cage d'ionisation, donnée par les indices OV et Vp, est de géométrie rectangulaire alors que la partie VL1, VL2, VL3 (3 électrodes formant une lentille de Einzel) ainsi que la suite de l'optique (collimateurs), sont de géométrie cylindrique dont l'axe de rotation se trouve être le faisceau d'ions.

La source d'électrons est composée d'un filament en tungstène rhénium venant de Pfeiffer (MS cube). Ce dernier est fixé sur des tiges brasées dans un bloc en alumine (*Figure IV-62*) permettant la polarisation ainsi que le passage du courant.

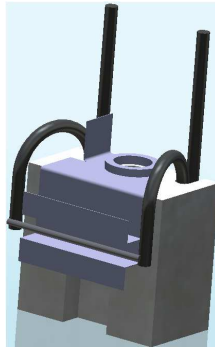


Figure IV-62 : Filament MS Cube de Pfeiffer utilisé comme émetteur d'électrons dans la source d'ionisation de PALOMA.

La *Figure IV-62* montre une électrode qui entoure une partie du filament. Celle-ci sert de repousseur d'électrons. Cette partie doit être plus négative que le filament pour repousser les électrons vers le volume d'ionisation.

Une série d'électrodes permet d'optimiser le fonctionnement de la source d'ionisation, elle est constituée de plusieurs éléments. Le diaphragme d'entrée dans la source d'ionisation (VLE), les grilles d'entrée et de sortie de la cage d'ionisation (Vcorps), la cage d'ionisation (nommée 0V sur la *Figure IV-61*), le collecteur d'électrons (Vc), la grille poussant les ions dans l'optique (Vp), la grille d'extraction des ions (Vextr), une série de trois électrodes (VL1, VL2 et VL3), les deux collimateurs et le collecteur d'ions (Vions).

Une mesure du courant d'électrons se fait sur Vc et une mesure du courant d'ions se fait sur Vions. Le courant dans le filament est environ 2.6A avec un potentiel de -90V, le repousseur est à -100V. Ces paramètres permettent d'obtenir un courant de $\sim 10\mu\text{A}$ sur Vc, qui correspond aux courants utilisés pour le fonctionnement de l'instrument PALOMA. Les potentiels sélectionnés pour la polarisation du filament sont choisis afin d'obtenir un taux d'ionisation maximal dans le volume d'ionisation, qui est de l'ordre de 100eV comme le montre la *Figure IV-60*.

Un protocole simple permettant de mettre en évidence la formation d'ions dans le volume d'ionisation consiste à réaliser une mesure du courant d'ions sur le collecteur d'ions en fonction de la pression dans l'enceinte à vide. Une vanne aiguille est connectée sur l'enceinte afin de pouvoir faire entrer du gaz dans la source d'ionisation. La *Figure IV-63* obtenue est déterminée pour la source seule sur une grande gamme de pression.

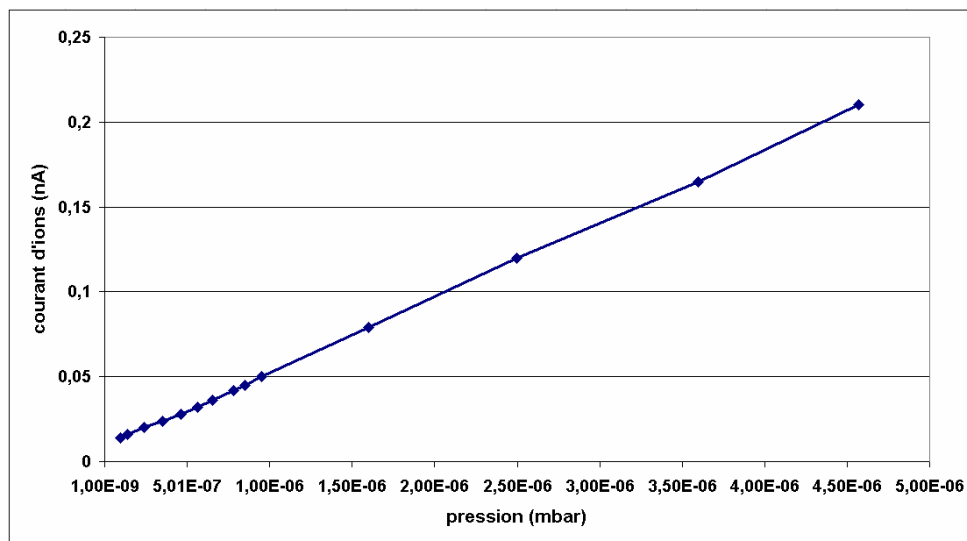


Figure IV-63 : Courbe de variation du courant d'ions sur le collecteur en fonction de la pression à l'intérieur du caisson à vide.

La variation linéaire du courant d'ions en fonction de la pression montre que la source d'ionisation fonctionne nominalement.

3.3. Détecteur

Le détecteur doit permettre la détection de courant inférieur au pico-Ampère (pA). Pour cela, l'utilisation de galettes micro-canaux devient nécessaire. La Figure IV-64 présente une vue en coupe du détecteur. Celui-ci est composé de :

- deux galettes micro-canaux (MCP) dont le fonctionnement est présenté dans la section 3.3.1 du chapitre IV,
- d'une grille de mesure de temps de vol de 50% de transparence associée à une électronique sur un PCB qui est un circuit imprimé (PCB temps de vol), décrite dans la section 3.4.2.4 du chapitre IV,
- d'une mesure de la position de l'impact sur le détecteur à partir d'une surface composée de triangles (PCB triangle), détaillée section 3.3.2 du chapitre IV venant du dispositif SYDELO (SYstème DE Localisation) initialisé par le CETP (Berthelie, communication personnelle).

L'entrée du détecteur se fait par une grille polarisée à -40V qui correspond au potentiel flottant de l'instrument. La seconde grille est polarisée à -2250V pour forcer les électrons secondaires formés lors de l'impact des ions sur la galette de retourner vers les MCP. Celles-ci sont polarisées à -2200V (voir paragraphe suivant).

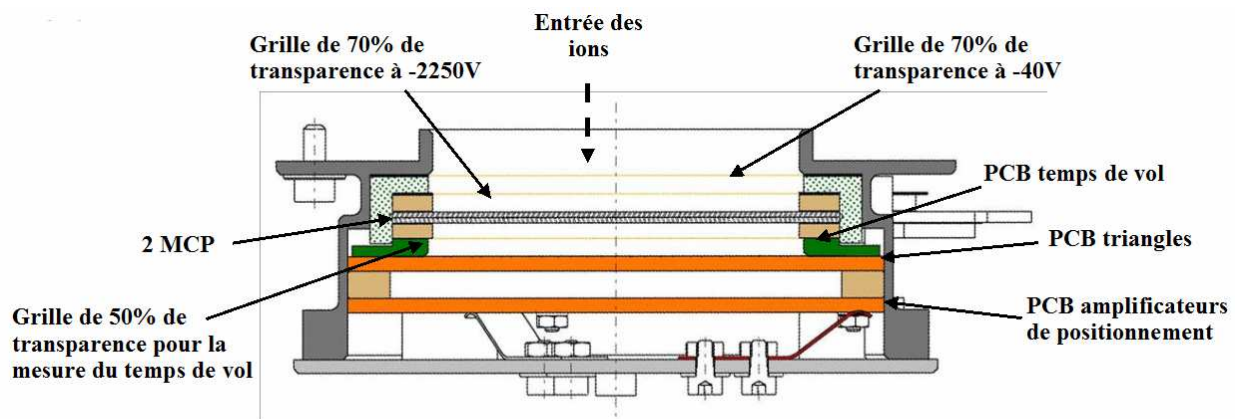


Figure IV-64 : Vue en coupe du détecteur.

3.3.1. Micro Channel Plate (MCP)

Une galette à micro-canaux est constituée de céramique d'une épaisseur de $\sim 1\text{mm}$ elle-même composée de milliers de tubes de $\sim 10\mu\text{m}$ de diamètre recouvert de métal. En appliquant une forte polarisation sur la face avant de cette galette, l'impact d'une particule provoque l'éjection d'électrons secondaires qui vont engendrer une cascade de collisions dans le tube et ainsi donner un courant mesurable en sortie de cette galette. Son fonctionnement est similaire à celui d'un photomultiplicateur. La Figure IV-65 montre le principe de fonctionnement de ces galettes.



Figure IV-65 : Vue schématique des MCP. Crédits Photonis.

Pour le développement de notre détecteur, le choix du fabricant des MCP s'est porté sur Photonis. Pour augmenter le signal en sortie de galettes, il est possible de superposer ces dernières. Le gain (facteur multiplicatif du nombre d'électrons entre entrée et sortie des MCP) en sortie d'une galette est typiquement de 10000 pour une polarisation de 1200V sur une galette. Le détecteur est composé de deux MCP superposées à une polarisation de -2200V. Une grille placée

devant les MCP est polarisée à -2250V, c'est à dire à une différence de potentiel de 50V avec les MCP qui permet aux électrons secondaires formés lors de l'impact des ions sur la face avant des MCP de retourner vers les MCP. La face arrière des MCP est polarisée à -40V pour éviter de créer des flashes avec la grille de mesure du temps de vol. L'utilisation de cette double MCP et du potentiel de -2200 V donne un gain de 10^6 en sortie des MCP. Lorsque ces galettes sont sous vide, une gerbe d'électrons est émise aléatoirement sur la surface des galettes. Ceci est un bruit propre aux MCP (Fraser et. al 1987) qui est de l'ordre de 1 coup/s/cm² sur le détecteur. Les signaux mesurés en sortie des MCP doivent être obligatoirement supérieurs à ce bruit pour être mesurés.

3.3.2. Mesure du positionnement

3.3.2.1. Collecteur triangles

Le collecteur triangle est fabriqué à partir d'un circuit imprimé. Il est composé de 32 triangles, disposés tête-bêche. Les triangles sont composés d'une surface dorée et sont indépendants les uns des autres. Entre chaque triangle, il y a une distance de 0.2mm. Par ailleurs, une résistance de 1.2kΩ est placée entre chaque triangle. Les triangles disposés sur les bords (triangle 1 et 2 à gauche, et 31 et 32 à droite), comme le montre la *Figure IV-66.a*, sont reliés à des amplificateurs de charge qui vont permettre de différencier les signaux et ainsi déterminer la position d'impact sur le détecteur. Lorsque des électrons impactent le collecteur, un courant se crée sur les triangles, passe par les résistances et est acheminé vers les amplificateurs de charge. Différentes tensions apparaissent alors sur les quatre amplificateurs de charge (T1, T2, T31 et T32, correspondant aux quatre triangles). L'amplitude de ces tensions permet de déterminer la position du point d'impact.

La *Figure IV-66.b* montre le schéma fonctionnel des triangles avec le schéma électronique.

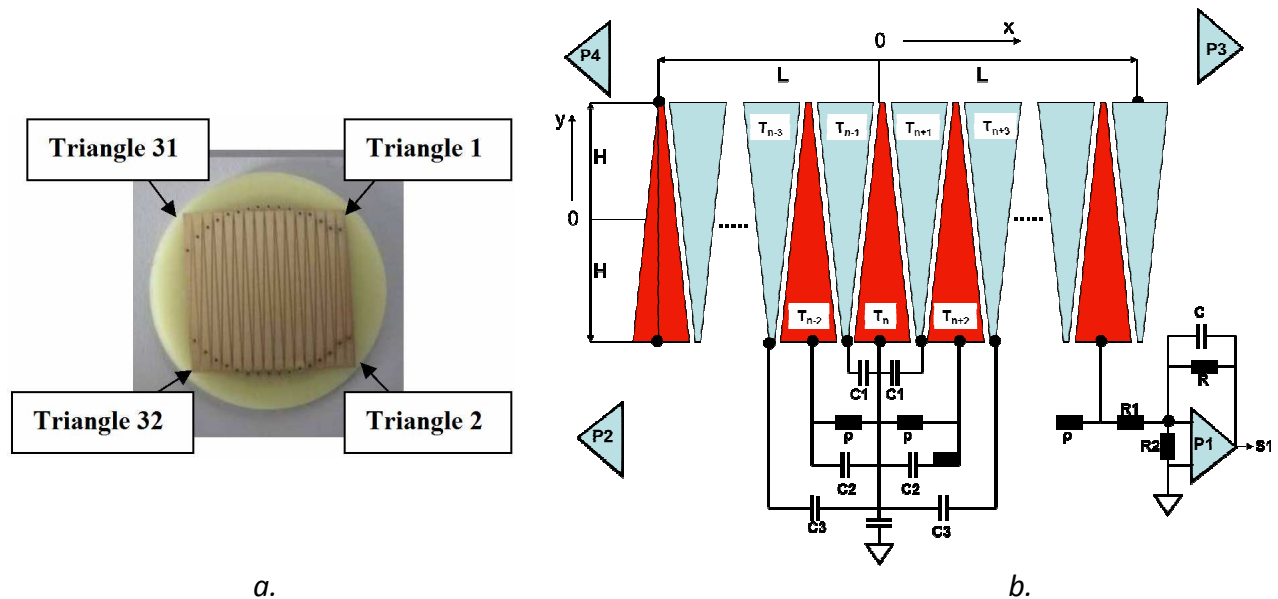


Figure IV-66 : a. Photo du détecteur de positionnement basé sur le principe de triangles. b. Schéma électronique du principe de positionnement par l'utilisation de triangles.

3.3.2.2. Système triangle et amplificateurs

Un PCB avec quatre amplificateurs AD825 a été réalisé et est connecté au PCB triangles. La Figure IV-67 montre l'agencement des amplificateurs de charge sur le circuit imprimé.

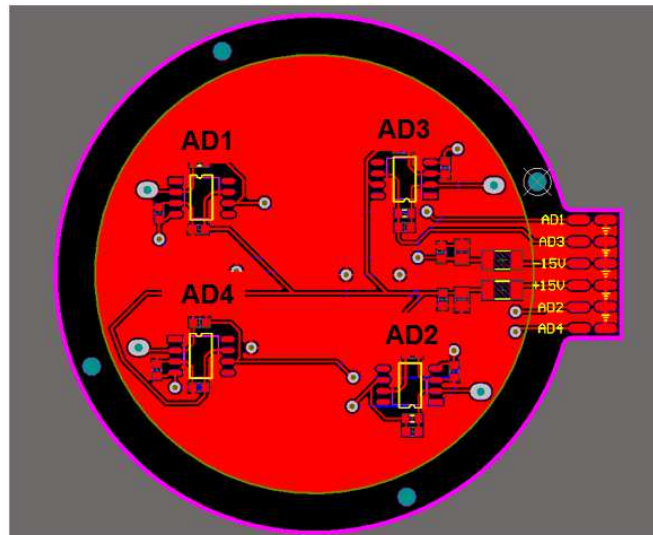


Figure IV-67 : Schéma du PCB de positionnement avec les 4 amplificateurs

Chaque amplificateur est testé séparément afin de vérifier leur fonctionnement avant de connecter le PCB position avec le PCB triangle.

Un signal carré d'amplitude 2V sur une capacité de 2 pF en série avec l'entrée est appliqué sur chaque amplificateur. Les temps de montée et de descente du signal sont de 5 ns. Sa période est de 2 μ s.

3.3.2.3. Mesure de signaux à partir d'une injection générée par une pastille

Afin de tester l'ensemble PCB triangles et PCB position, nous utilisons une pastille d'un diamètre de 8mm et d'épaisseur de 1.6mm qui génère un signal équivalent à une impulsion produite par les MCP. Nous étudions alors la variation des signaux obtenus sur les amplificateurs de charge en fonction de la position de la pastille sur le PCB triangles, comme le montre la Figure IV-68.

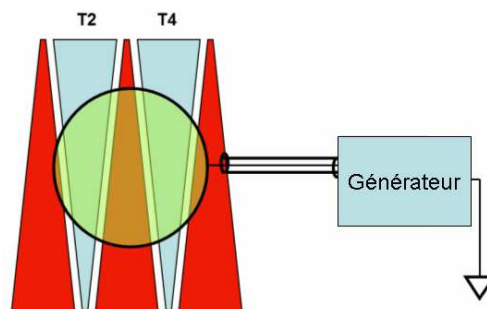


Figure IV-68 : Schéma d'explication de l'utilisation de la sonde de manière à calibrer le détecteur de positionnement. La sonde possède un diamètre de 8mm pour une épaisseur de 1.6mm.

La sortie des signaux des amplificateurs de charge est connectée à un oscilloscope qui permet de visualiser les signaux et de déterminer l'amplitude de chaque sortie. La *Figure IV-69* illustre les signaux obtenus sur l'oscilloscope lorsque la pastille se trouve au centre du PCB triangles, les quatre signaux possèdent la même amplitude.

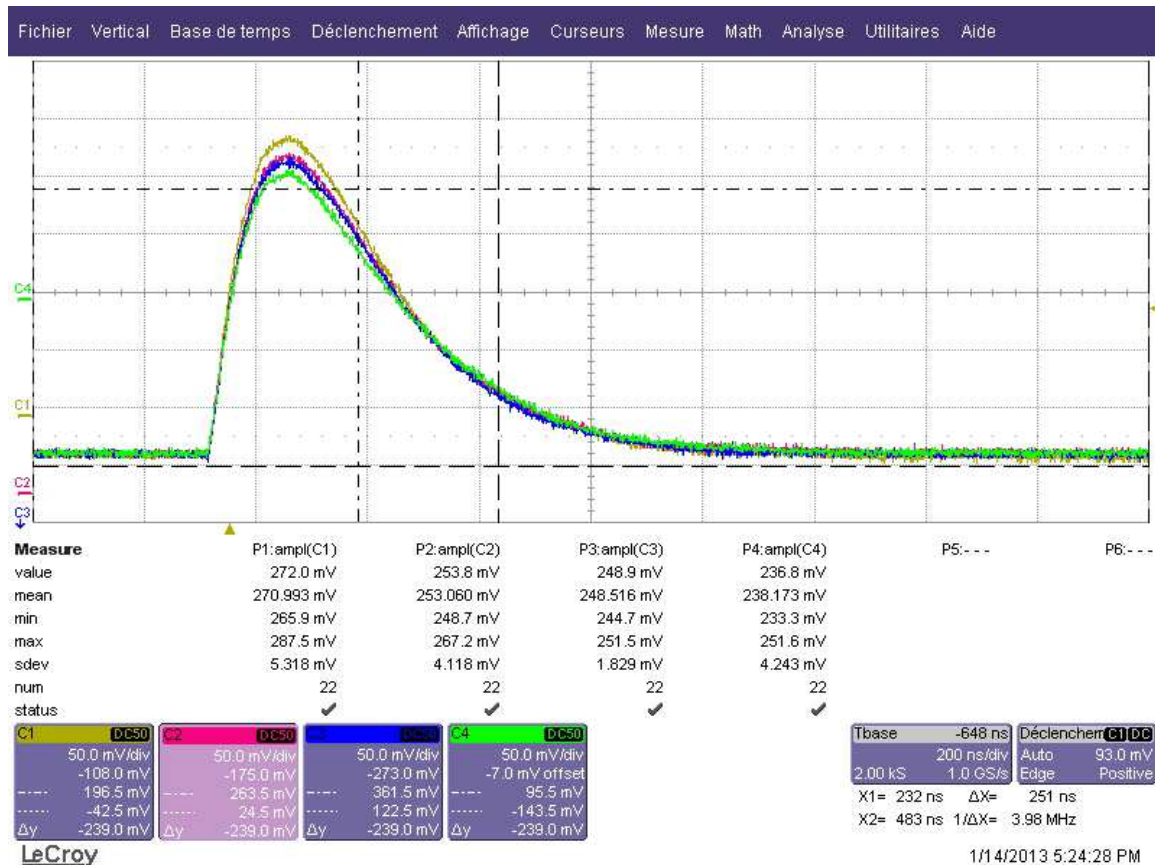


Figure IV-69 : Signaux de sortie des amplificateurs lorsque la pastille se trouve au milieu du PCB triangles.

Une calibration de ce dispositif est réalisée en mesurant la variation des amplitudes en fonction de la position de cette pastille sur le PCB. Le rapport des amplitudes donne ensuite la position de la pastille à la surface. Par la suite, nous utiliserons la dénomination, AD1, AD2, AD3 et AD4. La dénomination T1, T2, T31 et T32 ne sera utilisée que dans le cas de la calibration. La *Figure IV-70* montre le positionnement des axes et des points de mesure sur le détecteur de positionnement.

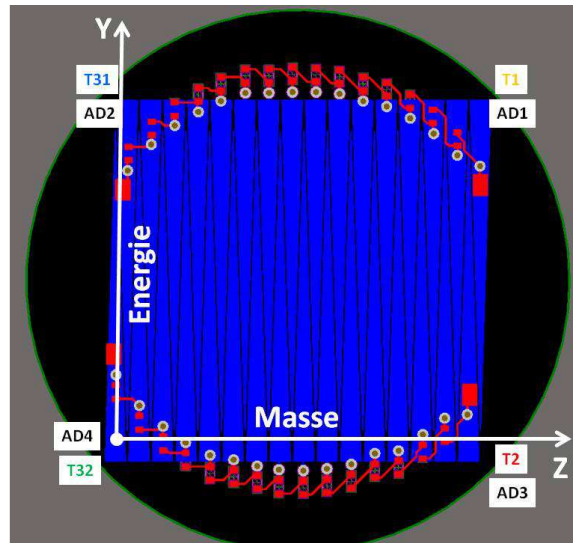


Figure IV-70 : Définition des axes et numéros des amplificateurs.

Trois jeux de calibration ont été faits en utilisant la pastille avec une impulsion produite avec une tension de trois valeurs ; 1 V, 1.5 V et 2 V. Sur les 4 amplificateurs T1, T2, T31 et T32 est mesurée la hauteur de l'impulsion en mV, respectivement V1, V2, V31 et V32. La position apparente de l'impulsion est alors reconstruite à partir des rapports :

$$Z = \frac{(V31+V32)}{(V1+V2+V31+V32)} \text{ et } Y = \frac{(V2+V32)}{(V1+V2+V31+V32)} \quad (\text{IV-22})$$

25 impulsions ont été placées de manière équidistante sur le plan du détecteur, c'est-à-dire, un quadrillage de 5 par 5 (positions en Z : 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 et similaire en Y). La Figure IV-71 représente la position apparente des impulsions lors de la calibration calculée suivant la formule IV-22. On voit sur cette figure que les positions changent peu en fonction de l'intensité de l'impulsion. Nous poursuivrons en utilisant le premier jeu de calibration pour 2 V.

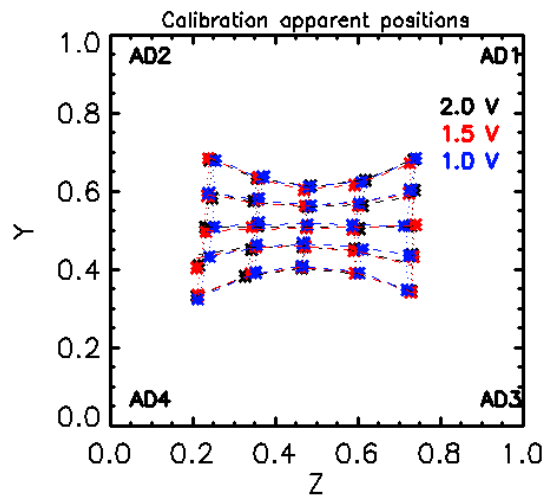


Figure IV-71 : Position apparente des impulsions lors de la calibration dessinée sur le plan du détecteur. La position des 4 amplificateurs est également indiquée. Les traits pointillés représentent des ajustements polynomiaux réalisés sur chaque série de points en X et en Y.

Afin de délimiter les extrémités de chacune des 16 cellules définies par les 25 impulsions, un ajustement polynomial (d'ordre 2) est réalisé sur chaque groupe de points en Z et en Y (25 polynômes sont ainsi définis). Pour l'instant, les 5 points d'impulsion utilisés pour chaque polynôme ont le même poids. On pourra par la suite associer des poids différents, notamment pour les points situés au bord du détecteur.

Le but du travail suivant est de reconstruire une fonction de transfert afin d'associer une position apparente avec une position reconstruite en utilisant les calibrations. On utilise par exemple une dizaine d'impulsions dont la position apparente est représentée sur la *Figure IV-72* ci-dessous :

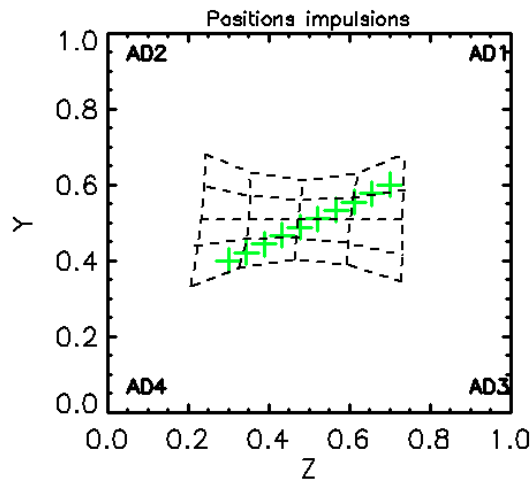


Figure IV-72 : Positions apparentes d'une série d'impulsion (croix vertes). En traits pointillés noir sont représentés les ajustements polynomiaux.

La première étape consiste à trouver la cellule dans laquelle a eu lieu une impulsion. Une fois cela fait, on détermine les deux polynômes passant par le point de l'impulsion à partir des bords inférieurs de la cellule et du point d'impulsion comme illustré sur la *Figure IV-73*. On détermine ensuite les 4 points d'intersection entre ces deux polynômes et les bords de la cellule : (0,0), (0,1), (1,0) et (1,1). On calcule ensuite la distance séparant chacun de ces 4 points des coins de la cellule le long du polynôme. Ce calcul est fait numériquement. On a donc 8 valeurs définissant la position relative de chacun de ces points le long d'un axe de la cellule.

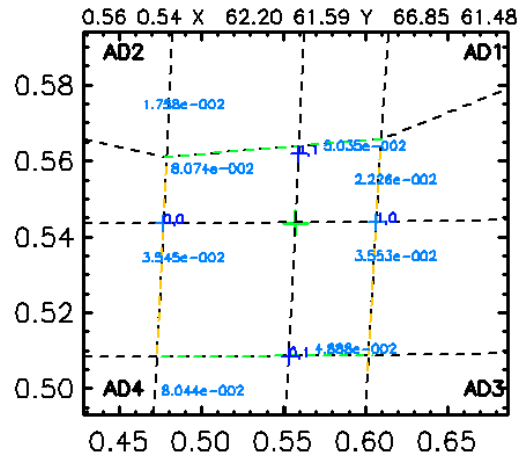


Figure IV-73 : Méthode de calcul de la position d'un point sur la grille de la calibration. Les deux polynômes passant par le point de l'impulsion (croix verte) sont représentés par des traits pointillés noirs (calculés aux points du maillage). Les quatre points (0,0), (0,1), (1,0) et (1,1) à l'intersection entre ces deux polynômes et les bords sont indiqués par des croix bleues (avec leur indice). En bleu, sont indiqués les distances entre les 4 points et les coins de la cellule (8 valeurs).

La dernière étape consiste à utiliser ces 8 valeurs pour définir 4 points le long des axes du vrai détecteur. A partir des 4 points (0,0), (0,1), (1,0) et (1,1) reconstruits dans le plan réel du détecteur, on construit deux droites passant par (0,0) et (1,0) et par (0,1) et (1,1). Leur intersection donne la position dans le plan réel de l'impulsion (Figure IV-73).

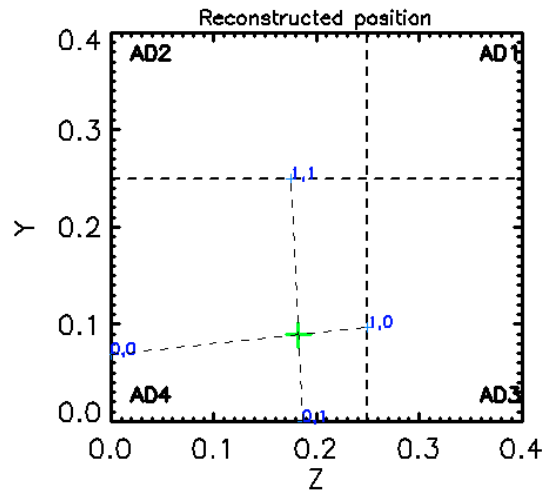


Figure IV-74 : reconstruction de l'impulsion dans le plan réel du détecteur

On fait cela pour les 10 impulsions montrées Figure IV-72. La Figure IV-75 présente la position reconstruite des 10 impulsions montrées Figure IV-72.

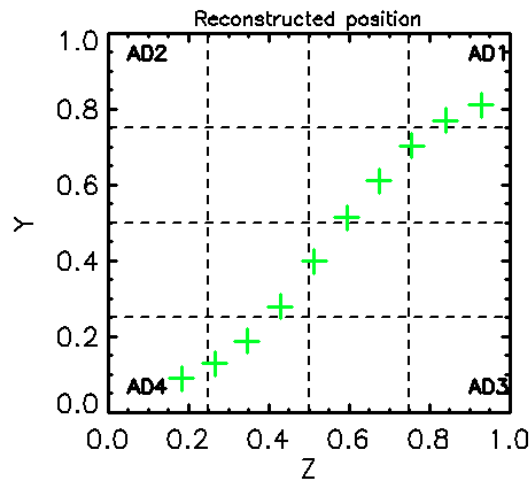


Figure IV-75 : Position des impulsions mesurées et illustrées Figure IV-76 dans le plan réel du détecteur.

Il est possible à présent de réaliser des tests en utilisant le bruit des MCP (voir 3.3.1 du chapitre IV) comme générateur de signaux.

3.3.2.4. Mesure des signaux en sortie des MCP

La pression dans l'enceinte à vide lors des tests est de 3×10^{-8} mbar. La polarisation des MCP est de -2200V à l'avant des MCP et de -40V en sortie. La grille se trouvant devant les MCP est à -2250V, ce qui permet d'éviter aux ions de rebondir sur la surface des galettes et de multiplier ainsi le signal. La polarisation de -40V en sortie des MCP évite de réaliser des flashes sur l'électronique qui se situe en sortie des MCP. La Figure IV-77 montre les signaux obtenus sur l'oscilloscope de la sortie des amplificateurs de charge.

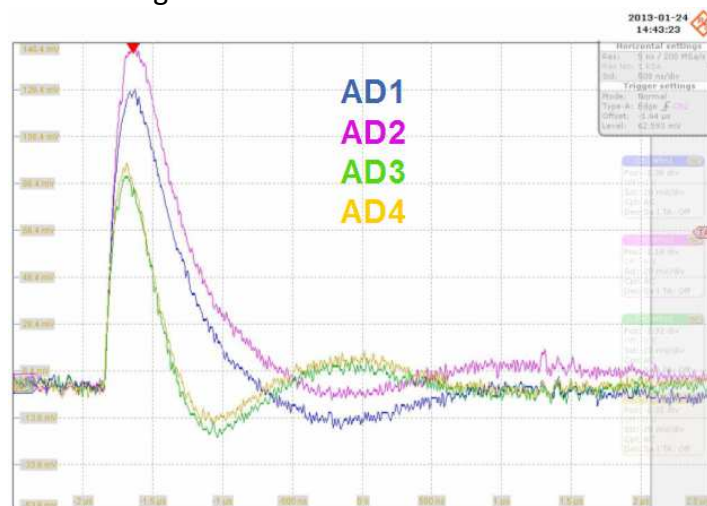


Figure IV-77 : Signal obtenu sur l'oscilloscope en sortie des MCP sur les 4 amplificateurs de positionnement. Ce signal correspond au bruit des MCP.

Le bruit électronique est suffisamment faible pour obtenir un bon signal.

3.4. Tests du prototype NIMEIS

3.4.1. Détecteur double collecteur

Une mesure est réalisée en utilisant un double collecteur pour mettre en évidence le fonctionnement de l'instrument selon l'axe de distribution en énergie. Son concept consiste à placer deux collecteurs de cuivre qui donnent chacun une mesure du courant comme le montre la *Figure IV-78*. Lorsque le potentiel de l'électrode V_p de la source d'ionisation varie (*Figure IV-61*), l'énergie des ions change, ce qui fait ensuite varier le courant sur les deux collecteurs. Dans le cas idéal, avec un V_p faible ($<7V$, ce qui donne une bande en énergie de 0 à 7eV), tout le courant est mesuré sur l'électrode du bas (Low collector). Lorsque le potentiel est plus fort, le courant devient plus important sur le collecteur du haut (High collector) mais il reste toujours un peu de courant au niveau du collecteur du bas.

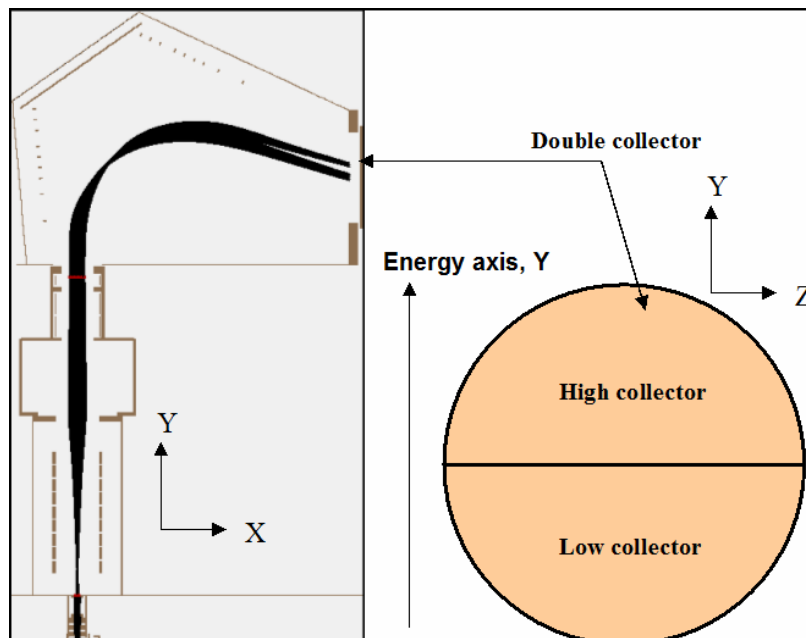


Figure IV-78 : Vue en coupe du prototype de NIMEIS. La source d'ionisation de PALOMA a aussi été simulée et se trouve à l'entrée de l'optique d'accélération sur le bas de la vue en coupe. La figure de droite représente la configuration du détecteur composé de deux parties permettant de mettre en évidence la séparation en énergie.

La *Figure IV-78* montre aussi une vue en coupe de l'instrument modélisé sous SIMION® où la source d'ionisation a été rajoutée pour la simulation. Il est possible de faire ensuite une comparaison entre les courants mesurés et les résultats de simulation en faisant une variation du potentiel V_p . La *Figure IV-79* donne le résultat de l'expérience comparé à la simulation où le rapport des courants a été déterminé pour le cas des résultats de simulation ainsi que les courants obtenus sur le double collecteur du prototype de NIMEIS. Il y a bien une mesure de courant sur le collecteur du bas lorsque V_p est faible et le courant sur le collecteur du haut devient plus important lorsque le potentiel de V_p devient fort. Pour cette mesure, une pression de 7×10^{-5} mbar et un courant de $10.5 \mu A$ sur V_c ont été utilisés.

Sur la *Figure IV-79* on constate que les formes des courbes mesurées et simulées sont en bon accord, étant donné, notamment, l'aspect un peu rudimentaire de cette mesure globale de courant. On constate un écart de l'ordre de 1V sur V_p au niveau du point de croisement des courbes détecteur haut/détecteur bas. Cet écart pourrait s'expliquer par le fait que les électrons dans la source PALOMA ionisent le gaz dans un volume qui est déplacé par rapport à la position que nous avons supposée et que l'énergie des ions est donc légèrement différente de celle que nous supposons. La vérification de cette interprétation demande une modélisation plus précise de la source PALOMA et des mesures avec une instrumentation dédiée de l'énergie des ions en sortie.

Le courant simulé est déterminé en normalisant le rapport des courants avec les mesures.

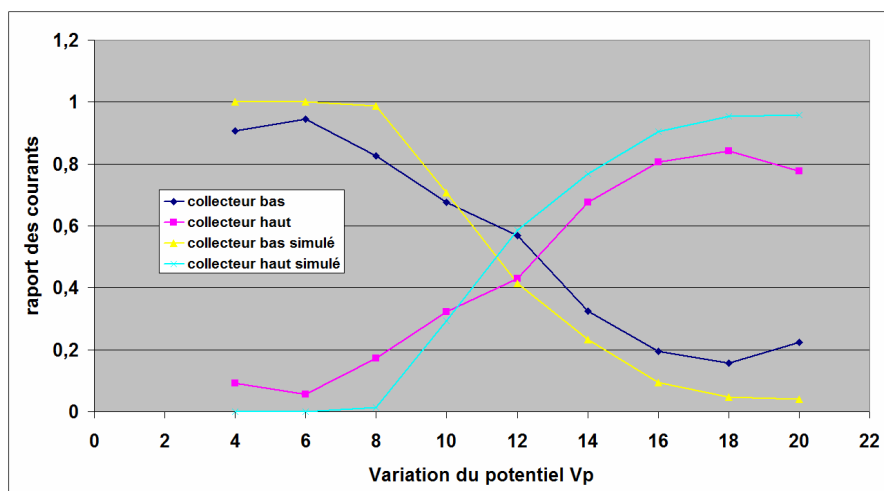


Figure IV-79 : Courbe de variation des rapports de courants obtenus sur le double collecteur en fonction du potentiel appliqué sur V_p pour le cas du prototype ainsi que le modèle de simulation.

La concordance entre les mesures effectuées sur le prototype et les résultats de simulation montre que le modèle numérique de l'instrument reproduit relativement bien la réalité. Les optimisations et améliorations de l'instrument par le modèle numérique peuvent être considérées comme réalistes.

3.4.2. Détecteur final

3.4.2.1. Mesure de bruit

Les galettes à micro-canaux et l'environnement de l'instrument génèrent des coups aléatoires en permanence. Il est possible de reconstruire la position de ces coups. Une des difficultés rencontrées jusqu'à maintenant réside dans le mauvais fonctionnement de l'amplificateur de la mesure du temps de vol.

Dans ces conditions, nous avons été obligés d'utiliser l'un des 4 amplificateurs pour déclencher la mesure du signal (initialement, le déclenchement devait se faire sur la mesure du temps de vol). Afin de réduire le biais induit par le choix arbitraire d'un des 4 amplificateurs, cette mesure a été répétée avec les 4 amplificateurs successivement. La mesure des amplitudes sur les 4

amplificateurs et la reconstruction de la position des impacts en utilisant les formulations de l'équation (IV-22) donne une distribution de l'intensité des impulsions et une répartition des coups décrite sur la Figure IV-80.

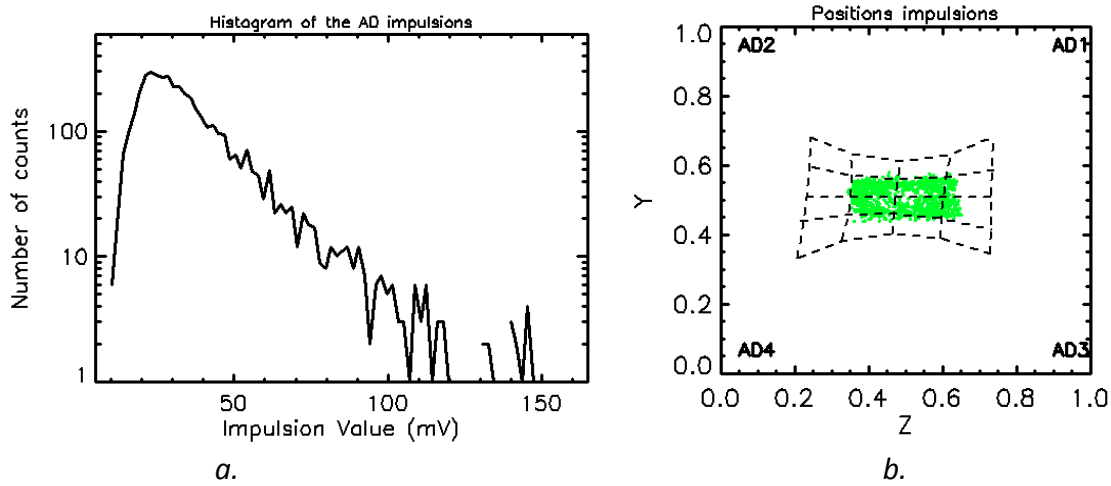


Figure IV-80 : a. Distribution des valeurs de la hauteur d'impact mesurée sur les 4 amplificateurs (4x1200 valeurs). b. Position des coups (1200 points) dans le plan du détecteur en utilisant les formules (1) pour calculer la position de chaque impact à partir des mesures des 4 amplificateurs. Les lignes pointillées noir représentent le quadrillage de la calibration décrite précédemment.

Le pic de la distribution de la Figure IV-80.a est à 22 mV (indépendamment de la résolution de l'histogramme). Il correspond à peu près à la valeur du seuil utilisée pour déclencher la mesure sur l'oscilloscope. Cette distribution est surprenante puisque avec la méthode utilisée on aurait dû voir beaucoup plus de valeurs d'impulsion inférieures à ce seuil, seul l'un des 4 amplificateurs étant utilisé pour déclencher la mesure à chaque fois... D'après la Figure IV-80.b, tous les impacts sont dans la zone de calibration. Si on applique la méthode de reconstruction de la position de l'impact décrite précédemment, les coups à la surface du détecteur se répartissent alors sur le détecteur comme décrit sur la Figure IV-81 ci-dessous.

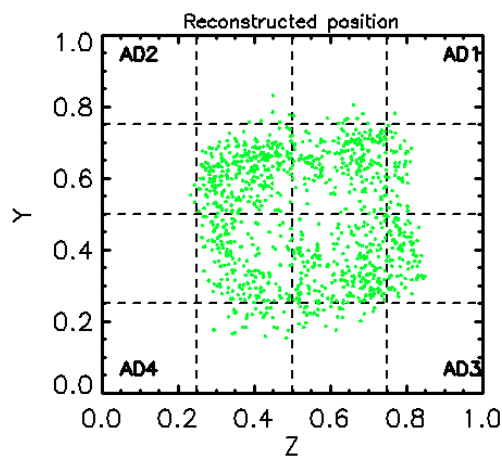


Figure IV-81 : Image 2D (énergie/masse) des impacts sur le détecteur après avoir réalisé la fonction de transfert.

La répartition des impacts ne se fait pas sur la totalité du détecteur. Cela vient probablement soit du mauvais fonctionnement très non-linéaire au bord du détecteur que la calibration ne reproduit pas convenablement, soit de la calibration elle-même. Cela fera partie des améliorations à faire.

On peut notamment changer les formes et distribution des triangles ainsi que les résistances et capacités entre les triangles. Enfin, l'absence de coups au centre du détecteur suggère un mauvais fonctionnement des galettes dans leur partie centrale. Là encore, des tests de calibration nous permettront de formaliser l'origine de ces défauts.

3.4.2.2. Modifications du prototype

Afin de pouvoir réaliser des mesures sur une bande en énergie, nous plaçons un système de 3 grilles à la sortie de la source d'ionisation pour filtrer les énergies entrant dans l'instrument.

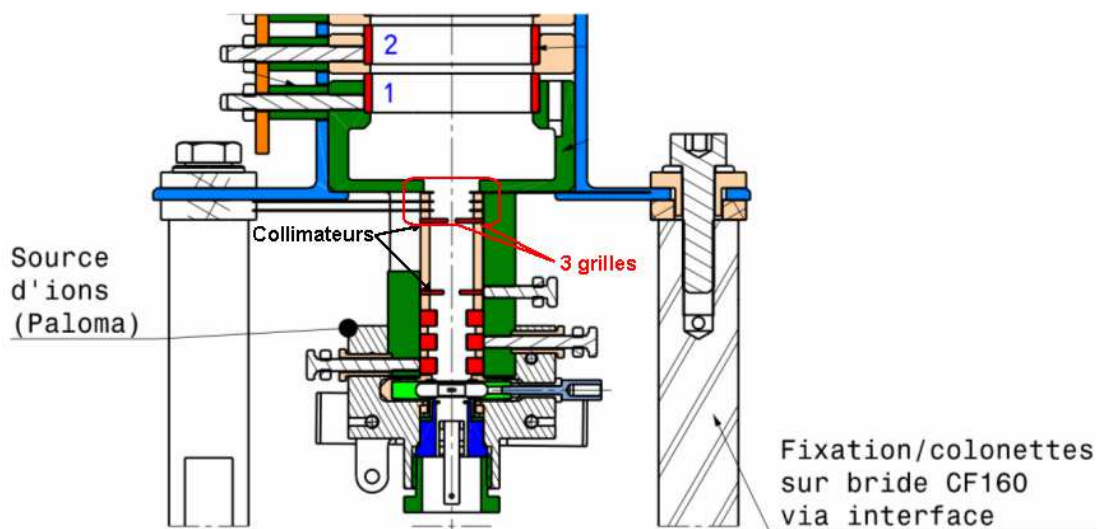


Figure IV-82 : Vue en coupe de l'instrument au niveau de la source d'ionisation avec l'emplacement des 3 grilles nécessaires pour l'étude du temps de vol. Le haut de l'image correspond à l'entrée dans l'optique d'accélération.

L'ajout des 3 grilles se fait entre la sortie de la source d'ionisation et l'optique d'accélération. Ceci a pour effet d'augmenter le chemin optique de 2mm. Les performances de focalisation de l'instrument sont alors dégradées, sachant que les lentilles de l'optique ont été optimisées sans les 3 grilles. La solution pour corriger cet effet sera d'optimiser les potentiels de l'optique d'accélération avec cette nouvelle géométrie de manière à focaliser au bon endroit. Les ions créés ont une énergie comprise entre 0eV et la valeur de V_p qui est le potentiel du poussoir d'ions. La polarisation de la grille G2 (celle du milieu) avec les deux autres à la masse, permet de couper les énergies inférieures au potentiel de G2. Cela nous permet de réaliser une étude de l'énergie des ions.

La Figure IV-83 donne l'allure de la distribution en énergie de la source d'ionisation lorsque nous fixons V_p à +9V et varions G2 par pas de 0.5V de 0V à 10V. Nous mesurons le nombre de coups sur le détecteur sur une minute puis nous faisons la différence du nombre de coups entre la

valeur précédente de G2 et la suivante, ce qui nous permet de reconstruire la distribution en énergie.

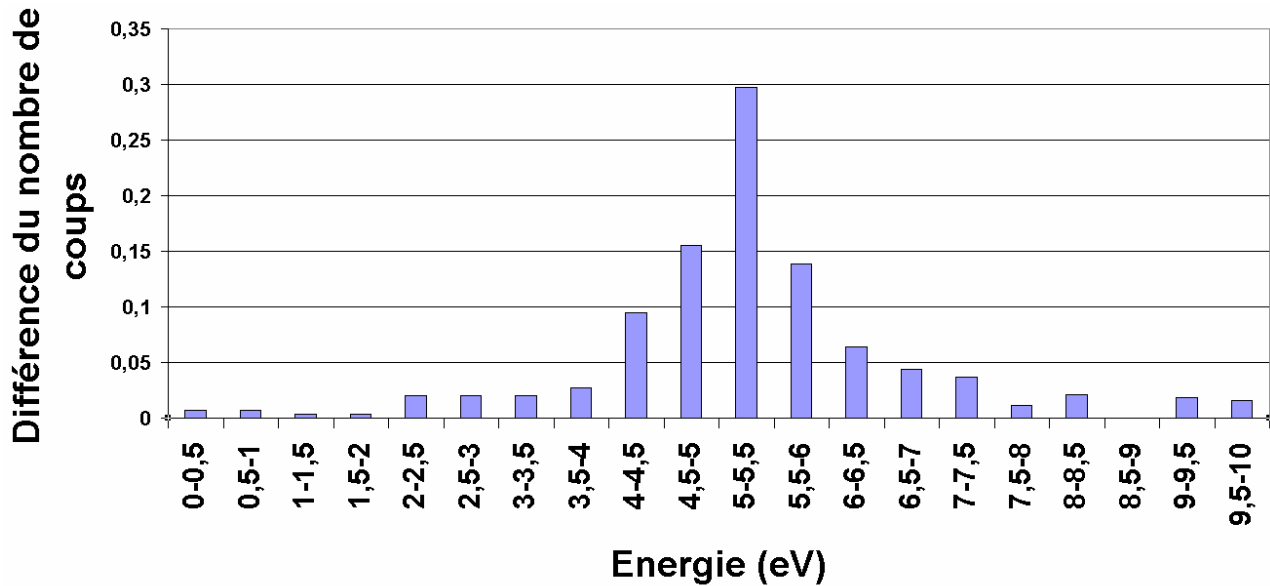


Figure IV-83 : Distribution en énergie obtenue en fixant V_p à +9V et en variant le potentiel de G2 par pas de 0.5V de 0 à 10V, en fonction de l'énergie moyenne obtenue en faisant la moyenne des deux valeurs d'énergie pour une différence de coups donnée.

Lorsque V_p est à +9V, l'énergie des ions est autour de 5eV. La majorité des électrons présents dans le volume d'ionisation est située dans la partie centrale de la source (entre V_p et la grille d'extraction). Les ions nouvellement créés devraient avoir une énergie maximale autour de $V_p/2$, mais nous pensons que le potentiel de la grille V_p modifie la distribution de densité des électrons dans le volume d'ionisation ce qui explique les résultats obtenus sur la *Figure IV-83*, où une énergie maximale de 5eV est obtenue pour un potentiel V_p de +9V. La même mesure est réalisée avec un potentiel de +15V sur V_p comme le montre la *Figure IV-84*. Dans ce cas là, l'énergie moyenne est de 10eV.

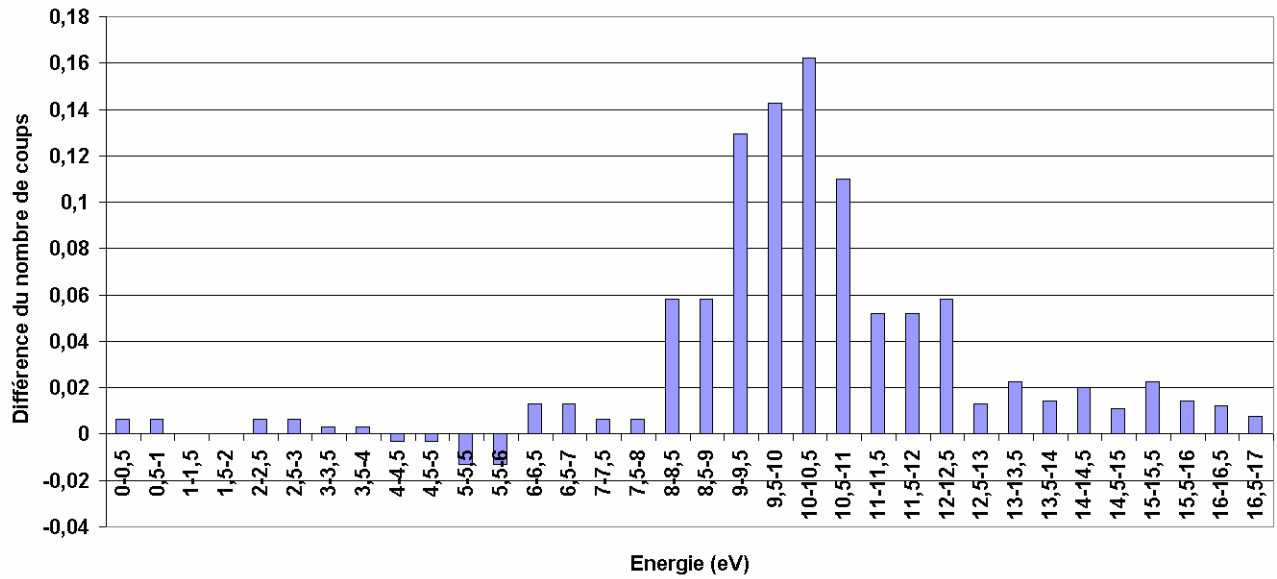


Figure IV-84 : Distribution en énergie obtenue en fixant V_p à +15V et en variant le potentiel de G2.

L'ensemble V_p/G_2 nous permet de jouer sur la bande passante en énergie qui entre dans l'instrument. En s'assurant que le nombre d'ions impactant le détecteur soit bien supérieur au bruit des MCP, il est possible de diminuer l'écart entre V_p et G2.

3.4.2.3. Variation du rapport V_p/G_2

Une étude est réalisée sur la variation du rapport V_p/G_2 où un écart réduit est choisi entre le potentiel de V_p et le potentiel de G2. L'objectif est de mettre en évidence la variation des impacts sur le détecteur selon l'axe des énergies. Pour cela, deux jeux de potentiels sont choisis, $V_p=+7V/G_2=+5V$ et $V_p=+14V/G_2=+12V$.

Afin de vérifier les résultats obtenus, un modèle de simulation englobant la source d'ionisation et les trois grilles est réalisé. La Figure IV-85 montre une simulation d'un tir d'ions depuis la source d'ionisation dans le cas où $V_p=+14V$ et $G_2=+12V$.

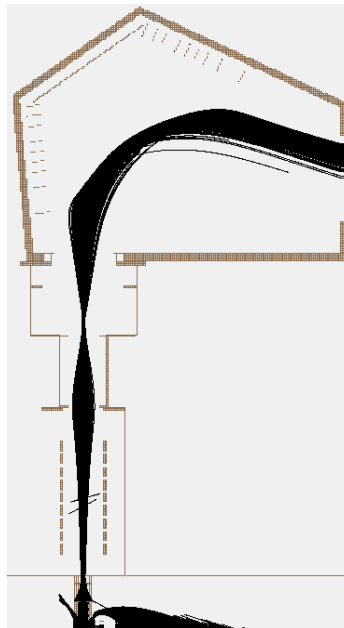


Figure IV-85 : Vue du modèle de simulation avec $V_p +14V$ et $G2 +12V$ où un tir de 1×10^6 ions est réalisé depuis la source d'ionisation PALOMA représentée en noir. Ce tir se fait aléatoirement dans le volume d'ionisation.

La Figure IV-86 montre la distribution des impacts sur le détecteur selon l'axe des énergies dans le cas de la simulation avec $V_p = +7V$ et $G2 = +5V$. L'énergie des ions est alors comprise entre 5eV et 7eV. La distribution est étalée sur la partie basse du détecteur. Normalement, la distribution devrait être plus resserrée mais le rajout des 3 grilles à l'entrée de l'optique d'accélération pose des problèmes de focalisation sur le détecteur. En effet, l'ajout des 3 grilles se fait entre la sortie de la source d'ionisation et l'optique d'accélération. Ceci a pour effet d'augmenter le chemin optique de 2mm. Les performances de focalisation de l'instrument sont alors dégradées. Comme expliqué précédemment, ce défaut devrait pouvoir être corrigé.

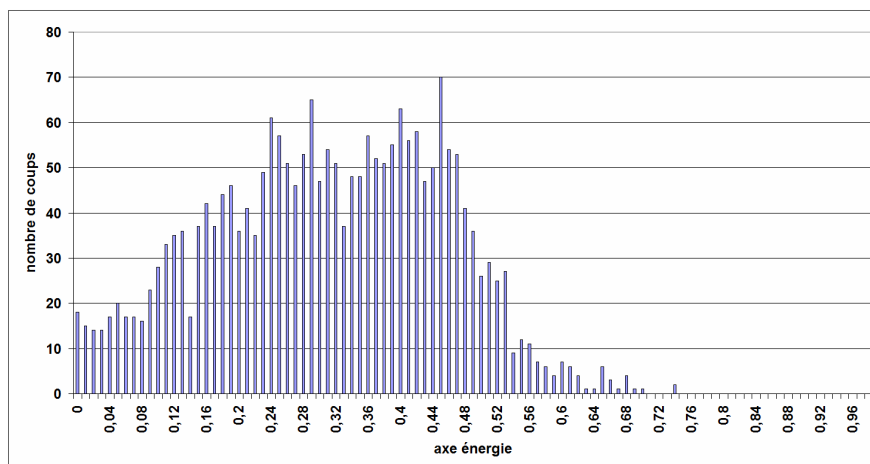


Figure IV-86 : Simulation des impacts sur le détecteur dans le cas où $V_p = +7V$ et $G2 = +5V$ avec un tir de 1×10^6 ions dans la source d'ionisation.

Nous devrions à présent nous attendre à obtenir une distribution d'impact essentiellement inférieure à 0.5 le long de l'axe de l'énergie sur le détecteur pour les tests sur le prototype dans la même situation du jeu de potentiel de $V_p/G2$. La Figure IV-87 donne ce résultat pour le prototype après avoir utilisé la fonction de transfert déterminée par la calibration du détecteur (section 3.3.2.3 du chapitre IV). La moyenne des pics varie autour de 0.48, ce qui est bien inférieur à 0.5 comme le montre la simulation. Cependant l'étalement des impacts est très différent, ce point sera revu par la suite.

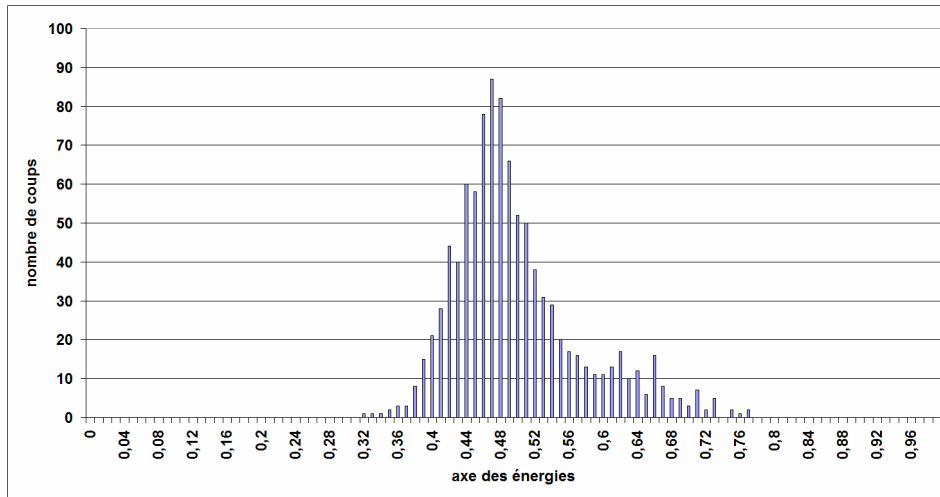


Figure IV-87 : Distribution des impacts sur le détecteur du prototype dans le cas où $V_p=+7V$ et $G2=+5V$, réalisée sur une mesure de 1000 coups. Le résultat est donné après avoir utilisé la fonction de distribution.

Pour le deuxième jeu de potentiels, $V_p=+14V$ et $G2=+12V$, l'énergie est comprise entre 12eV et 14eV. Le résultat de simulation est donné Figure IV-88. La distribution se déplace vers 0.8, ce qui montre que les ions impactent le haut du détecteur comme l'illustre la simulation de la Figure IV-85.

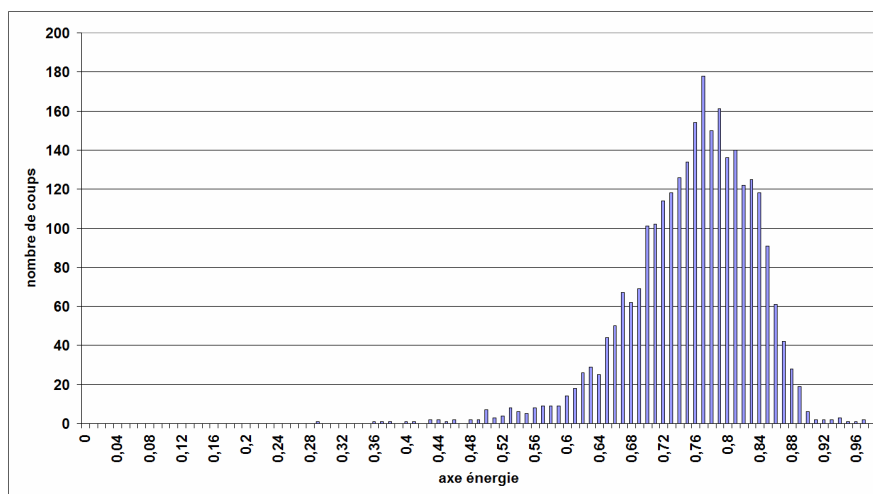


Figure IV-88 : Résultats de simulation pour le cas V_p+14V et $G2 +12V$ avec un tir de 1×10^6 ions dans la source d'ionisation.

Le résultat correspondant au prototype est donné *Figure IV-89*. La distribution est étalée autour de 0.57 en moyenne.

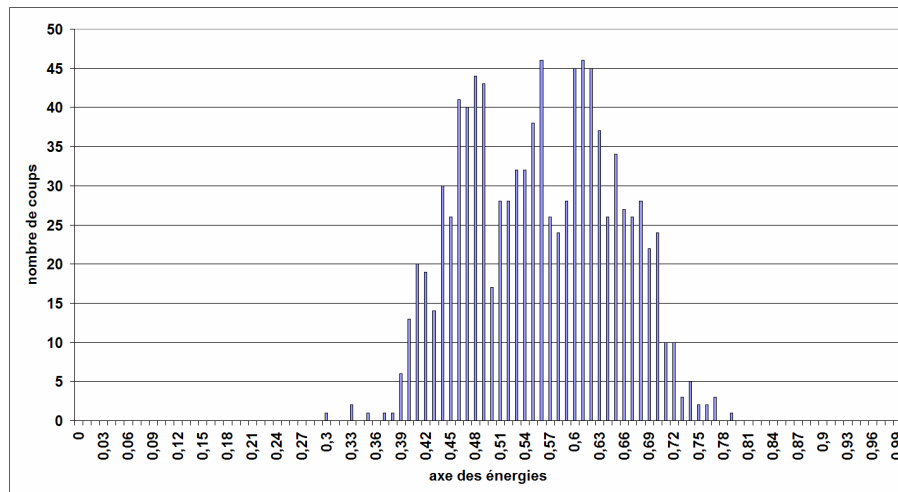


Figure IV-89 : Résultats d'impacts sur le détecteur dans le cas où $V_p=+14V$ et $G2=+12V$ pour le prototype avec 1000 coups mesurés. Le résultat est donné après avoir utilisé la fonction de distribution.

Le fonctionnement de la séparation en énergie sur le détecteur a été mis en évidence à partir du test de variation de l'ensemble $V_p/G2$ qui permet de définir une bande passante en énergie à l'entrée de l'instrument. Le résultat peut être amélioré en réduisant la bande passante en énergie et surtout en modifiant les potentiels de l'optique de focalisation qui permettra de bien focaliser sur le détecteur. Les résultats de simulation de la *Figure IV-90* où les potentiels de l'optique d'accélération ont été modifiés pour corriger le défaut de focalisation illustrent ce dernier point. Ce résultat est à comparer avec la *Figure IV-86* où les conditions de tir d'ions sont identiques, à savoir, $V_p=+7V$ et $G2=+5V$. L'optimisation des potentiels de l'optique d'accélération devrait donc nous permettre de réduire la distribution des coups sur le détecteur le long de l'axe des énergies.

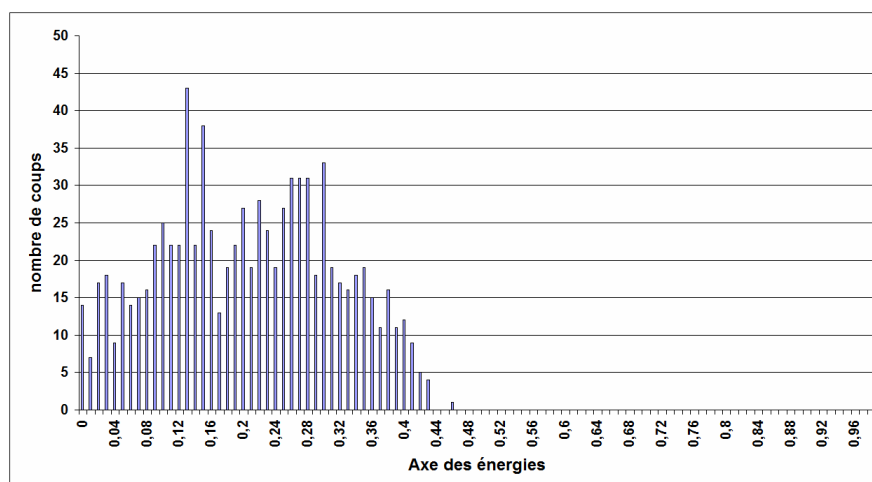


Figure IV-90 : Variation du nombre de coups sur le détecteur selon l'axe des énergies pour un tir d'ions depuis la source d'ionisation PALOMA avec $V_p=+7V$ et $G2=+5V$, pour un modèle de simulation où les potentiels de l'optique d'accélération ont été optimisés.

D'autre part, une autre source des différences entre simulation et mesure est attribuée au fonctionnement pas encore nominal du détecteur (section 3.4.2.1 du chapitre IV). Une meilleure calibration devrait nous permettre d'améliorer cette comparaison. Pour l'instant nous constatons à partir des mesures et de leur simulation une variation de la position des impacts le long de l'axe des énergies, qui reste cependant inférieure à la variation attendue, ainsi qu'un étalement de la zone impactée dans la simulation plus grande que mesurée. Pour ce dernier point, nous pensons que la méthode d'initialisation des ions dans la source (aléatoire dans tout le volume de simulation) engendre une plus grande dispersion en énergie des particules entrant dans l'optique de NIMEIS par rapport à la réalité.

3.4.2.4. Mesure en temps de vol

L'identification de la masse se fait par l'intermédiaire de la mesure du temps de vol des particules dans le réflectron (section 3.5 du chapitre III). Le temps "start" est donné par la position de l'impact sur le détecteur le long de l'axe des masses régie par le potentiel appliqué sur le déflecteur (section 2.3.3 du chapitre IV). Le temps "stop" est donné par la mesure d'une impulsion au passage des électrons par une grille de transparence de 50% placée en sortie des MCP comme le montre la *Figure IV-64*. La *Figure IV-91* montre un exemple d'impulsion obtenu en sortie de l'amplificateur temps de vol.

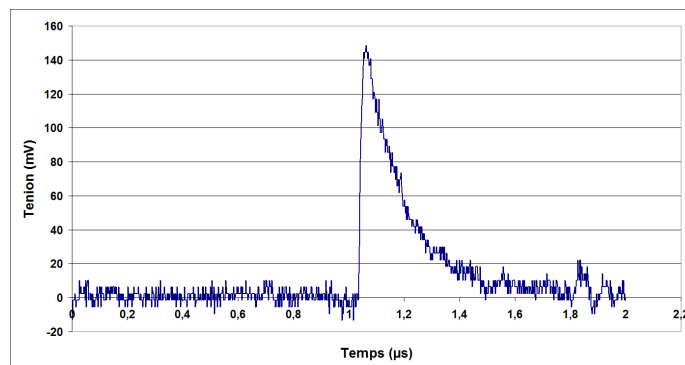


Figure IV-91 : Impulsion obtenue en sortie de l'amplificateur temps de vol.

Afin d'obtenir le temps "stop" avec une bonne précision, c'est à dire que le signal d'arrêt du chronomètre soit suffisamment rapide, le temps de montée de l'impulsion permettant la détection doit être rapide. Un temps de montée de 4ns est suffisant pour le prototype, ce qui donne un ordre de grandeur de la mesure à effectuer.

Un problème avec l'électronique du temps de vol ne nous permet malheureusement pas de réaliser de telles mesures pour l'instant (problème de court circuit entre la sortie des MCP et l'amplificateur temps de vol). Ce problème dont nous avons identifié l'origine sera corrigé lors des prochains tests.

Une mesure de la variation de la position des impacts selon l'axe des masses est toutefois possible de manière à mettre en évidence le fonctionnement du déflecteur. Ce test s'effectue en

utilisant AD1 pour déclencher la mesure. La même technique de calibration de la position que précédemment est utilisée. Les impacts mesurés correspondent aux ions entrant dans l'instrument et les coups de bruit dus aux MCP sur le détecteur.

Afin de s'assurer que nous mesurons plus d'impacts d'ions sur le détecteur que de coups générés par le bruit des galettes, nous nous assurons que le nombre de coups par minute est supérieur à 3 fois le nombre de coups dû au bruit des MCP. La Figure IV-92 présente le résultat de 1000 coups sur le détecteur dans le cas où le déflecteur se trouve à 0V (aucune déflexion à l'entrée du réflectron). Afin de limiter la dispersion en énergie, on applique aussi une tension d'extraction de 7V avec un potentiel pour filtrer les basses énergies de 5V sur l'électrode G2.

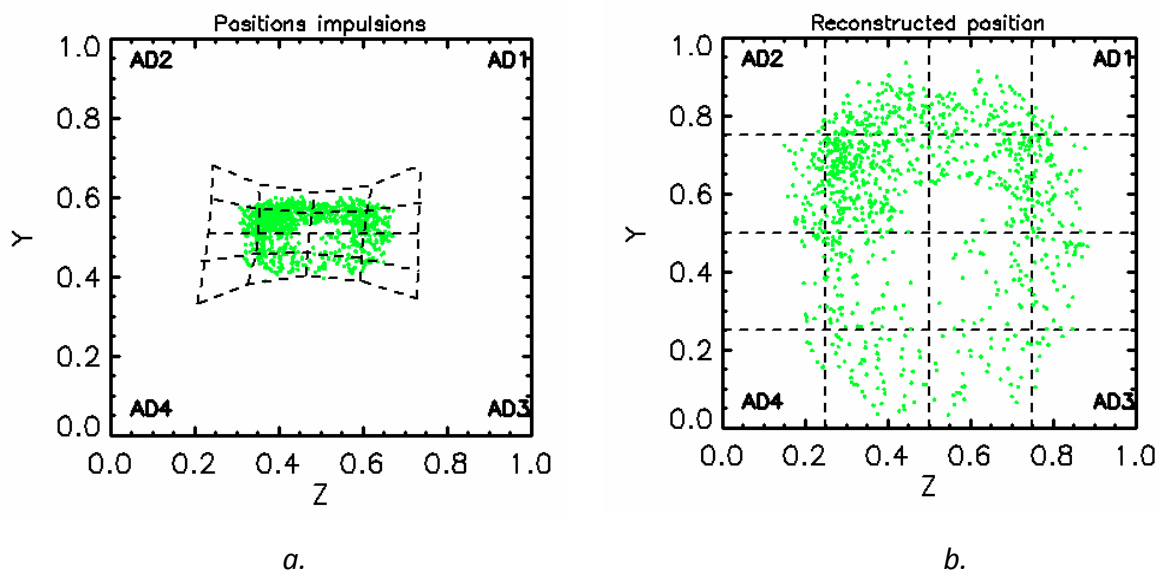


Figure IV-92 : Position des impacts des ions produits dans la source d'ionisation sur le détecteur. Une déflexion nulle a été appliquée sur le déflecteur à l'entrée du réflectron. a. position apparente. b. reconstruction des positions à partir de la calibration. 1000 coups ont été utilisés (après filtre pour supprimer les signaux uniquement dus au bruit électronique).

On répète ensuite la mesure en utilisant deux potentiels sur le déflecteur. La Figure IV-93 montre le résultat de cette expérience.

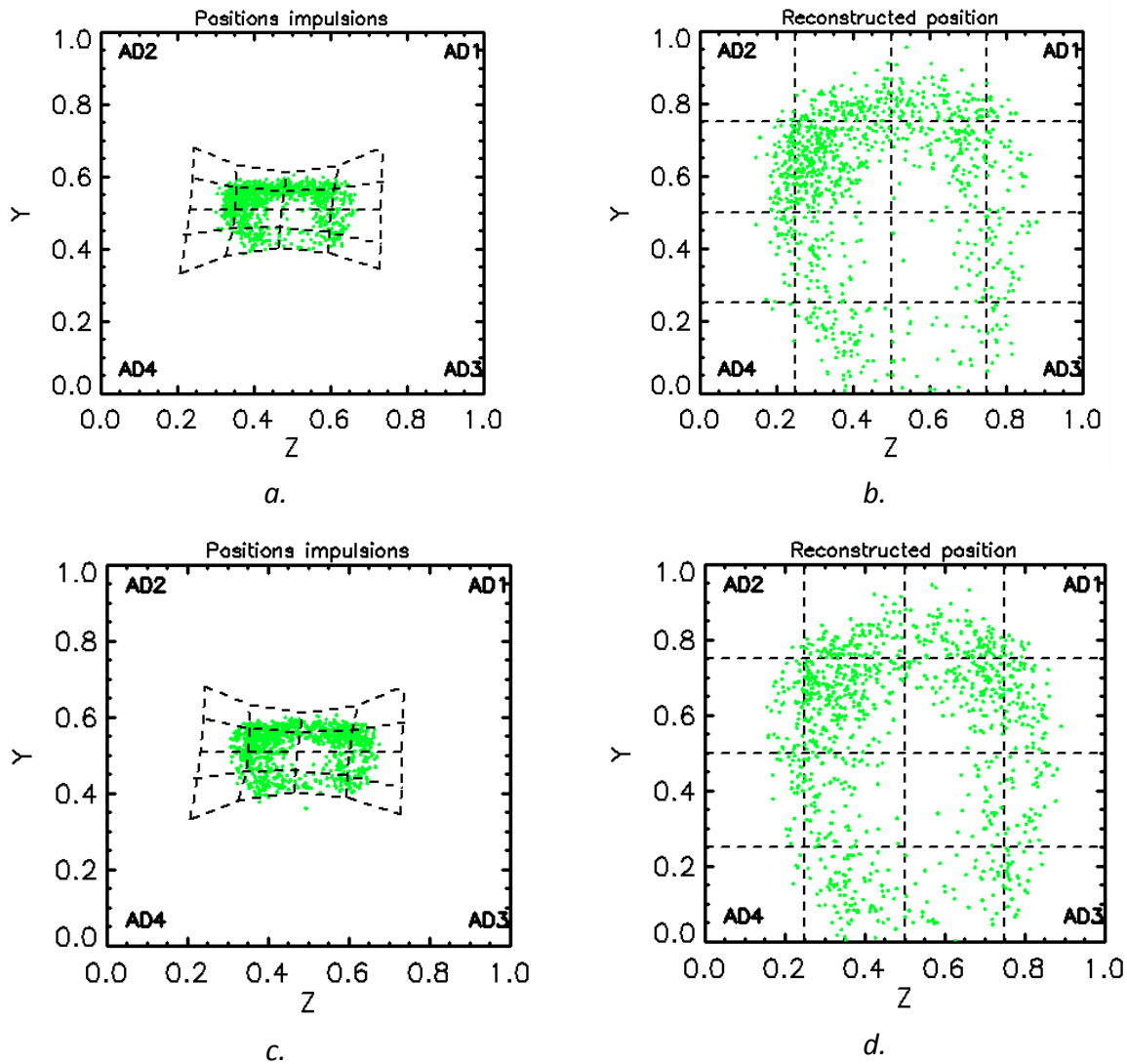


Figure IV-93 : Position des impacts des ions produits dans la source d'ionisation sur le détecteur. a. une déflexion de +20 et -20V a été appliquée avec la position apparente. c. une déflexion de -20V et +20V a été appliquée avec la position apparente. b reconstruction des positions à partir de la calibration dans le cas +20 et -20V sur le déflecteur. d. reconstruction des positions à partir de la calibration dans le cas -20 et +20V sur le déflecteur. 1000 coups ont été utilisés (après filtre pour supprimer les signaux uniquement dus au bruit électronique).

En comparant les figures de reconstruction pour les 3 cas de polarisation du déflecteur, une très légère variation de la position des impacts le long de l'axe Z (axe des masses) est constatée. Sachant qu'une polarisation de +40 et -40V est théoriquement suffisante pour atteindre les extrémités du détecteur on aurait dû constater une bien plus nette variation de la position des impacts. Une des limites à ce premier test peut venir de la calibration du détecteur qui n'est pas optimale mais peut surtout être liée à la défocalisation des ions sur le détecteur due à l'ajout des 3 grilles (voir section 3.4.2.2 du chapitre IV).

Il est possible aussi de comparer ces résultats avec la simulation de la distribution des impacts selon l'axe des masses pour le cas où le déflecteur est à 0V et $V_p = +7V$ et $G_2 = +5V$. La Figure IV-94 montre la distribution obtenue.

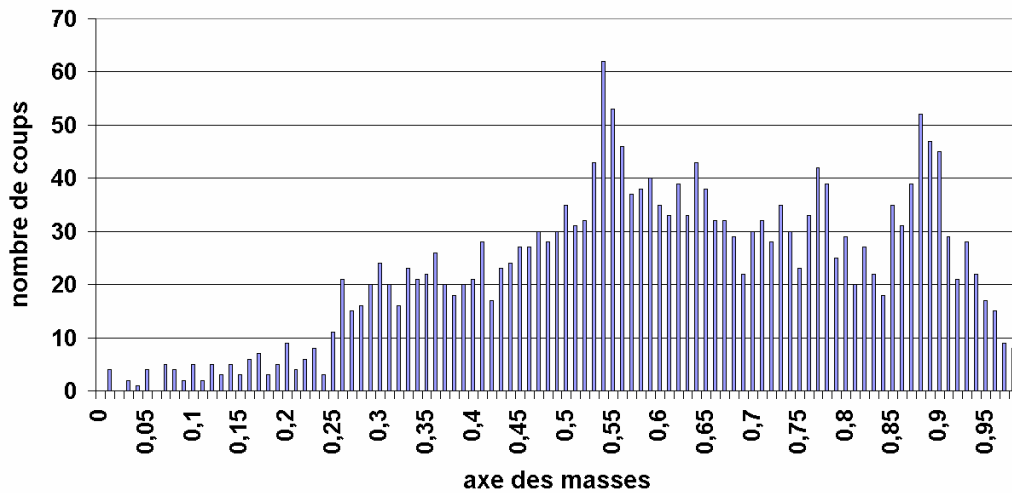


Figure IV-94 : Simulation de la distribution des impacts selon l'axe des masses lorsque le déflecteur est à 0V, VP=+7V et G2=+5V, pour un tir de 1×10^6 ions dans la source d'ionisation.

La distribution recouvre pratiquement toute la surface du détecteur selon cet axe. Il n'est pas étonnant alors de ne rien observer sur les mesures effectuées avec le prototype.

La résolution du problème de court circuit sur l'ampli temps de vol et l'optimisation des potentiels de l'optique d'accélération pour obtenir une meilleure focalisation sur le plan du détecteur devraient alors nous permettre de réaliser des mesures de temps de vol (voir section 2.3.3 du chapitre IV).

3.5. Résumé

Après avoir défini un modèle numérique satisfaisant par rapport aux objectifs scientifiques de NIMEIS, un prototype a été dessiné, puis fabriqué. La source d'ions de l'instrument PALOMA a été couplée à NIMEIS, nous donnant, après optimisation des potentiels, un courant d'ions de l'ordre de 50 pA à une pression de 10^{-6} mbar en sortie de la source d'ionisation (Figure IV-63). Les potentiels de l'optique sont délivrés par des convertisseurs DC/DC fixés sur les parties externes de l'instrument. Les premiers résultats de tests du prototype réalisés à partir d'un double collecteur selon l'axe des énergies nous ont permis de montrer le bon fonctionnement du modèle pour la séparation en énergie (section 3.4.1 du chapitre IV).

Le détecteur a été conçu au LATMOS utilisant un système de doubles MCP, une électronique de temps de vol et une électronique de positionnement. Une première étude des impacts sur le détecteur du bruit des MCP a permis de caractériser la fonction de transfert du détecteur de positionnement (section 3.3.2.3 du chapitre IV). Cette fonction de transfert montre les améliorations potentielles du système de positionnement.

Utilisant un système de 3 grilles à l'entrée de l'optique d'accélération (Figure IV-82) et le poussoir d'ions Vp de la source d'ionisation, une distribution de l'énergie est déterminée pour deux valeurs moyennes d'ions, 4.5eV et 10eV (Figure IV-83 et Figure IV-84). Une variation de la position d'impacts selon l'axe des énergies est constatée en variant les potentiels de l'ensemble Vp/G2 (Figure IV-87 et Figure IV-89). Cette étude démontre le fonctionnement de l'instrument selon cet

axe, malgré le fait que l'ajout du système de 3 grilles détériore la focalisation sur le plan et que la fonction de transfert ne soit pas tout à fait optimale.

Les prochaines étapes consisteront en l'amélioration du détecteur (correction du problème actuel sur l'ampli temps de Vol, nouvelle calibration du détecteur...), puis dans le changement des potentiels de l'optique d'accélération pour focaliser sur le plan du détecteur. Ces tests seront réalisés d'ici la fin de l'année 2013.

4. Source d'ionisation

4.1.Approche

Le spectromètre neutre NIMEIS nécessite une source d'ionisation performante. L'environnement étudié est composé de particules neutres de faible énergie ($< \sim 10\text{eV}$) et une faible densité ($< 10^8 \text{part.cm}^{-3}$) Deux techniques sont à notre disposition pour ioniser les particules :

- éjecter ou capturer un électron par impact électronique, photonique, ionique ou atomique,
- échanger un électron avec une particule ou un ensemble de particules.

A partir de ces deux techniques, plusieurs méthodes d'ionisation sont possibles. Il y a par exemple l'ionisation thermique, atomique, moléculaire, et électronique. L'ionisation thermique consiste à apporter suffisamment d'énergie à un gaz dans le but d'atteindre l'énergie d'ionisation du gaz. Les trois autres méthodes présentées ici produisent l'ionisation des particules par impact d'atomes, molécules ou électrons. L'impact électronique, la technique la plus utilisée, est le type d'ionisation auquel nous allons nous intéresser. Cela consiste à faire interagir les particules neutres avec des électrons dont la densité, l'énergie et la direction sont contrôlées. Dans le cas d'une ionisation d'un atome, lorsque l'énergie de l'électron est supérieure à l'énergie d'ionisation, la réaction se passe comme suit :



Où $e^{-'}$ correspond à l'électron éjecté de la particule avec une énergie inférieure ou égale à la différence entre l'énergie de l'électron et l'énergie d'ionisation.

Dans le cas d'une molécule, la réaction est :



La molécule chargée peut ensuite se dissocier.

La *Figure IV-60* montre la section efficace d'ionisation des composés atmosphériques typiques sur des objets comme Mars ou Ganymède en fonction de l'énergie des électrons.

4.1.1. Emetteurs d'électrons

A nouveau, il existe plusieurs méthodes permettant d'obtenir un courant d'électrons. Une cathode par émission thermoionique consiste à utiliser un filament composé d'un matériau réfractaire qui est chauffé (Murphy et al. 1956). L'inconvénient de l'utilisation d'un filament chauffé est la sublimation du filament, nécessitant un changement fréquent suivant le flux d'électrons émis ainsi que la consommation nécessaire pour son chauffage. Il est possible aussi

d'utiliser les électrons secondaires provenant d'une anode polarisée négativement par rapport au volume d'ionisation. En augmentant ensuite la différence de potentiel entre la cathode et l'anode, une grande quantité d'électrons est produite provoquant une avalanche de collisions, ce qui conduit finalement à la formation d'un plasma dans le volume d'ionisation avec des courants >mA : c'est la décharge électrique. Un autre procédé d'ionisation par impact électronique utilise les électrons ou les ions présents dans le volume d'ionisation pour amorcer et entretenir une décharge où l'énergie d'accélération des électrons est fournie par l'application d'une tension alternative. Ce sont les sources HF (haute fréquence). Les courants obtenus sont de l'ordre du mA dans le volume d'ionisation.

Le dernier procédé produit une accélération électronique par résonance cyclotron. Une induction magnétique baigne la source et est ajustée afin que la fréquence de rotation électronique soit égale à la fréquence HF. Il est possible d'obtenir des courants ioniques allant jusqu'à l'ampère en sortie de source.

L'avantage des deux dernières méthodes d'ionisation est la non usure d'une cathode, une source avec une durée de vie illimitée et une simplicité de fonctionnement.

La dernière possibilité est l'émission d'électrons par effet de champ, que nous appelons cathode froide (voir section 4.2.1 du chapitre IV) et qui utilise les propriétés d'effet tunnel d'un matériau pour en extraire les électrons (Gamow 1928). L'effet tunnel, mis en évidence par Gamov en 1928, est une conséquence de la mécanique quantique, et correspond à la capacité d'un électron d'énergie inférieure à l'énergie de Fermi d'avoir une probabilité non nulle de passer à travers la barrière de potentiel entre la matière et le vide.

4.1.2. Contraintes

Dans le domaine du spatial, l'utilisation d'un filament chauffé est généralement adoptée dans le cas d'une source d'ionisation. Les courants d'électrons étant de l'ordre de la centaine de μA comme sur PALOMA ou encore STROFIO (S.Orsini 2010), la décharge ou la résonance cyclotron n'est pas nécessaire. L'émission par filament chauffé amène toutefois trois problèmes dans notre cas. La consommation nécessaire pour extraire les électrons est relativement importante ce qui n'est pas négligeable dans notre situation d'instrument embarqué sur un satellite. Ensuite, le filament chauffé va dégazer son environnement immédiat et donner lieu à un signal parasite qui va entrer dans notre instrument. Le troisième problème vient du fait que l'émission d'électrons se fait à la surface du filament qui va donc créer un "pinceau" d'électrons dans le volume d'ionisation. La densité d'électrons étant importante dans ce "pinceau", une charge d'espace peut apparaître dans le volume d'ionisation. En rappelant que la gamme de particules neutres à étudier est de l'ordre de quelques eV (voir section 1 du chapitre III), nous allons la comparer à la charge d'espace créée dans le volume d'ionisation déterminée par la loi de Poisson. Pour avoir une idée de la charge d'espace créé par un faisceau d'électrons, un cas 1D de résolution de l'équation de Poisson est traité pour un cas d'une surface émettrice d'électrons S de 1cm^2 , avec un courant de $100\mu\text{A}$, sur une distance de 20mm comprise entre deux grilles à 0V . La résolution de l'équation de Poisson est donnée sous la forme :

$$\Phi = \frac{J}{\varepsilon_0} \sqrt{\frac{m}{2q\Phi_0}} x(x-d) \quad (\text{IV-23})$$

où Φ correspond au potentiel au point x , J est le flux, m et q respectivement la masse et la charge

des électrons, Φ_0 le potentiel initial de la surface émettrice et d la distance entre les deux grilles à 0V.

La Figure IV-95.a montre le schéma de principe du modèle de source 1D utilisé pour la détermination du potentiel créé par les électrons entre les deux grilles à 0V. La Figure IV-95.b montre le résultat obtenu, où un potentiel maximum de -0.95V est créé.

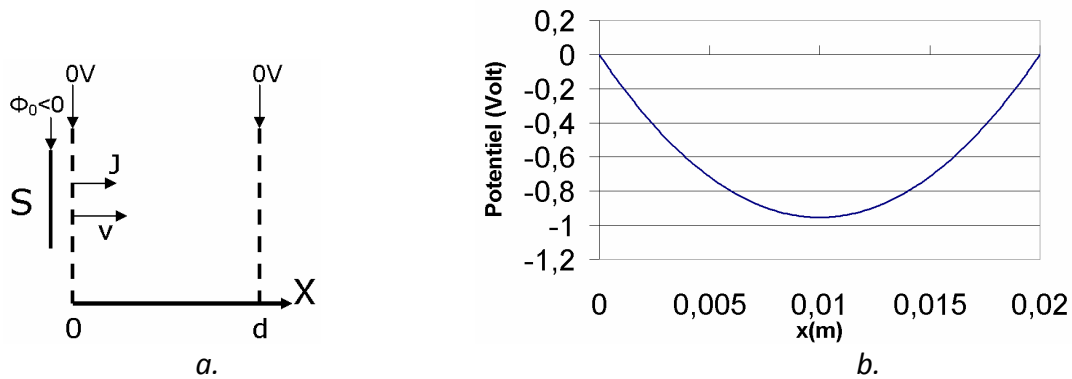


Figure IV-95 : a. Schéma d'explication des caractéristiques du modèle de calcul de charge d'espace dans le volume d'ionisation, avec une surface émettrice S de 1cm^2 , un courant de $100\mu\text{A}$ et une distance entre les deux grilles à 0V de 20mm. b. Courbe de variation de la charge d'espace Φ en fonction de la distance dans le volume d'ionisation.

Ce modèle simple nous montre le potentiel créé par les électrons dans le volume d'ionisation. Si les particules neutres ont une énergie inférieure à ce potentiel, les ions formés ne pourront pas passer cette barrière et ne seront pas analysés. D'autre part, les ions nouvellement créés verront leur énergie modifiée par ce potentiel ce qui rendra l'analyse en énergie envisagée par NIMEIS difficile. Afin de résoudre ce problème, un autre type d'émetteur d'électrons va être utilisé. Pour réduire la charge d'espace dans le volume d'ionisation, les électrons ne doivent pas être focalisés en un "faisceau". L'utilisation de nano tubes de carbone (CNT pour Carbon Nano Tubes) comme émetteurs d'électrons permet d'utiliser de grandes surfaces émettrices. Cela évite d'avoir un flux d'électron focalisé et permet d'obtenir une densité plus homogène dans tout le volume d'ionisation. L'avantage de l'utilisation de cathodes froide est aussi la consommation réduite nécessaire à l'émission d'électrons. Un état de l'art est proposé dans le paragraphe suivant.

4.2.Emetteurs CNT

4.2.1. Emission par effet de champ

Cette émission est basée sur un effet purement quantique qui permet aux électrons de franchir la barrière de potentiel entre un métal et le vide, c'est l'effet tunnel. Lorsque cette barrière de potentiel est suffisamment étroite (2-3nm), le caractère ondulatoire d'un électron lui permet de la traverser. A l'interface métal – vide, il est possible de réduire artificiellement la largeur de la barrière en appliquant un champ électrique E_{local} . Dans ce cas, des électrons peuvent être émis à température ambiante. C'est pour cette raison que le mécanisme prend souvent le nom d'émission froide. Toutefois, il faut appliquer un champ électrique local de l'ordre de $3000\text{ V}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ sur des métaux possédant un travail de sortie proche de 4.5 eV. Pour obtenir un tel champ, une

méthode a consisté à utiliser l'effet de pointe. En effet, une pointe possède un fort rapport d'aspect (rapport du diamètre du nanotube de carbone sur sa longueur) et permet de développer à son sommet un champ local, E_{local} , qui sera égal au produit du champ macroscopique, $E_{\text{appliqué}}$, par le facteur d'amplification, β , de la pointe. Dans ce cas, il devient possible d'émettre des électrons avec des champs électriques raisonnables. Le courant théorique d'émission des électrons a été déterminé par Fowler et Nordheim en 1928 à partir de la description de l'effet tunnel et du calcul du nombre d'électrons par unité de volume traversant la barrière.

Le courant d'émission est alors donné par la loi :

$$I = A \frac{1.42 \times 10^{-6}}{\phi} \beta^2 \left(\frac{V}{d} \right)^2 \exp \left(\frac{10.4}{\sqrt{\phi}} \right) \exp \left(- \frac{B \phi^{1.5} d}{\beta V} \right) \quad (\text{IV-24})$$

où I représente le courant d'extraction en ampère, A est un paramètre de la surface d'émission en m^2 , β est le facteur d'amplification sans unité, V le potentiel appliqué sur l'électrode au-dessus des CNT que nous appelons anode en volt, d la distance entre le haut des CNT et l'anode en mètre, B un coefficient qui vaut $6.44 \times 10^9 \text{ V.eV}^{-1.5}\text{m}^{-1}$ et ϕ le travail de sortie qui vaut typiquement 5eV.

Il existe essentiellement deux types de cathodes froides, les micro-pointes et les nanotubes de carbone (thèse de F. Cipriani 2006). Le travail de thèse de F. Cipriani consiste en partie à comparer l'émission d'électrons par micro-pointes et nanotubes de carbone et de définir le procédé le plus apte à devenir spatialisable. On en conclut que l'utilisation de nanotubes de carbone est plus facile à utiliser et plus stable. Le paragraphe suivant décrit les caractéristiques des nanotubes de carbone.

4.2.2. Etat de l'art

Un nanotube de carbone est composé d'une feuille de graphène refermée sur elle-même formant ainsi un cylindre comme le montre la *Figure IV-96*. Son diamètre est de l'ordre de quelques dizaines de nanomètre et sa longueur peut faire plusieurs micromètres. Ses caractéristiques en font un bon candidat à l'émission par effet de champ.

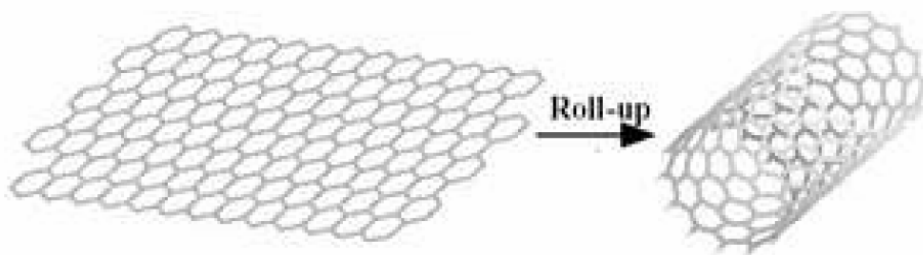


Figure IV-96 : Principe de formation d'un nanotube mono paroi (SWNT) basé sur la fermeture d'une feuille de graphène.

Il existe deux classes de nanotubes, les mono-parois (SWNT) et les multi-parois (MWNT) composés de plusieurs feuilles parallèles à l'axe. Ces derniers possèdent une bonne conductivité électrique.

Nous avons collaboré avec le professeur Lee et le docteur Hong du laboratoire Department of Physics & Division of Energy Systems Research Ajou University à Suwon en Corée du Sud qui nous ont fourni des CNT multi-parois. A partir de nos objectifs, des simulations réalisées et de notre créativité, nous avons développé ensemble un montage permettant d'extraire et de collecter les électrons.

La Figure IV-97 montre une photo prise par microscope électronique (MEB) de la surface des CNT. Les monotubes de carbone d'un diamètre de quelques dizaines de nm sont collés les uns aux autres pour former une colonne de CNT que nous utilisons pour l'assemblage de la première version (voir section 4.3 du chapitre IV).

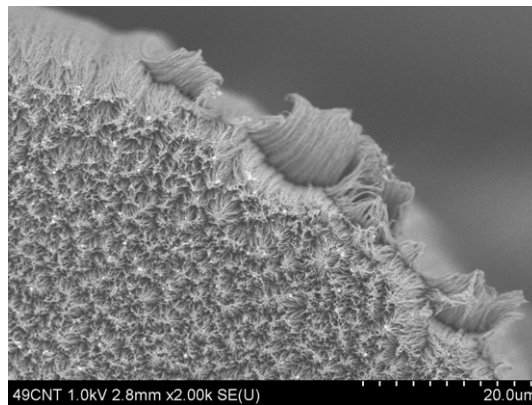


Figure IV-97 : Photo au MEB des CNT (MWNT) de la matrice 7x7 du premier assemblage sur le bord des CNT. On y voit les monotubes de carbone d'un diamètre de l'ordre de quelques dizaines de nm collés les uns aux autres. La surface du dessus n'est pas tout à fait plane, des monotubes de carbone sont plus long les uns que les autres.

4.2.3. Objectifs instrumentaux

Le développement de la source d'ionisation fait l'objet d'une R&T CNES de 2011 à 2013. Ceci nous permet de concevoir en collaboration avec le laboratoire sud-coréen un montage capable d'extraire les électrons avec la densité et l'énergie attendue.

L'émission par effet de champ permet de réduire la consommation ainsi que de contrôler le flux d'électron émis.

Les deux paramètres importants pour nous sont l'énergie moyenne des électrons qui doit être de l'ordre de 100eV de manière à maximiser la probabilité d'ionisation lors de la collision des électrons avec les particules neutres (section 3.2.1 du chapitre IV) et le flux d'électron que nous fixons à $100\mu\text{A}/\text{cm}^2$ afin de réduire les effets de charge d'espace dans le volume d'ionisation (section 4.1.2 du chapitre IV). La distance entre la grille extractrice et le haut des CNT permet de contrôler le potentiel d'extraction, donc de l'énergie des électrons. La surface totale d'émission correspond au nombre de sites émetteurs par cm^2 . La méthode d'optimisation vise à mesurer le courant d'électrons extrait pour différents dispositifs.

4.3.Optimisation de la méthode d'extraction

Afin d'obtenir des électrons dans le volume d'ionisation, l'anode doit avoir une transparence pour laisser passer les électrons. L'objectif est de récupérer le maximum d'électrons dans le volume d'ionisation. Le principe alors choisi est de placer une grille trouée dont le diamètre et l'emplacement des trous sont connus avec précision (*Figure IV-98*) et qui est placée au-dessus des CNT à une distance connue.

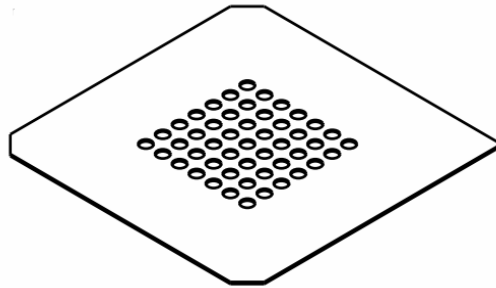


Figure IV-98 : Vue de la grille d'extraction formée de trous de forme circulaire où le diamètre et la position sont connus avec précision (<10 μ m).

Un travail de simulation est ensuite réalisé de manière à définir tous les paramètres optimaux pour un bon fonctionnement du montage.

A partir de simulations réalisées sous SIMION[®] pour comprendre les trajectoires des électrons en sortie des CNT (comme le montre la *Figure IV-99*), un premier montage d'extractions d'électrons a été réalisé. Le montage a la particularité de pouvoir changer de paramètres de hauteur, de diamètre des trous et épaisseur des grilles de manière à optimiser le courant collecté sur le collecteur.

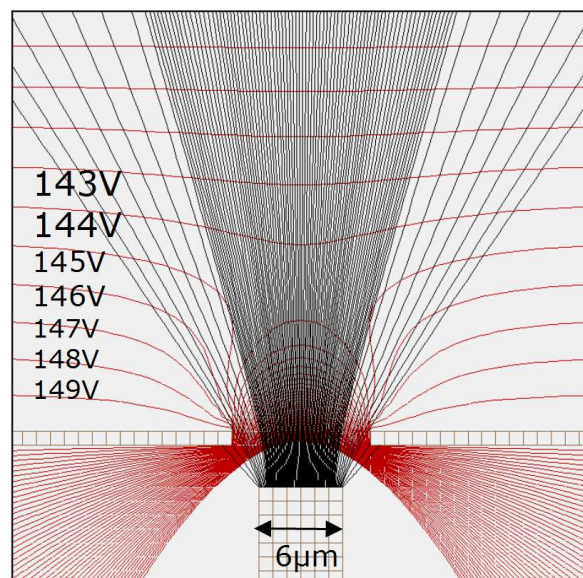


Figure IV-99 : Modélisation d'une colonne de nanotubes de carbone qui fait 6 μ m de diamètre avec une grille placée 4 μ m au dessus des nanotubes de carbone avec un diamètre de 10 μ m. Les trajectoires des électrons en sortie des nanotubes de carbone sont représentées en noir. En rouge sont tracées les équipotentiels allant de 100V à 149V avec un pas de 1V. La grille d'extraction est à 150V et le CNT est à 0V.

Les trajectoires des électrons (représentées en noir) de la *Figure IV-99* montrent que très peu d'électrons entrent théoriquement en collision avec la grille d'extraction.

4.3.1. Premier montage d'extraction

Un substrat de 15x15mm en silicium est utilisé pour faire croître des CNT sous forme de colonnes sur un réseau de 7x7 CNT avec un diamètre de 250 μm , une hauteur de 500 μm et espacés de 1mm. La *Figure IV-100 a.* montre le schéma de principe de l'extraction des électrons en utilisant des CNT. Les paramètres libres sont le diamètre des trous de la grille, la hauteur des CNT, la distance entre les CNT et la grille et la distance entre le collecteur et la grille. La *Figure IV-100 b.* montre une photo du substrat en silicium où croît le réseau de 7x7 CNT.

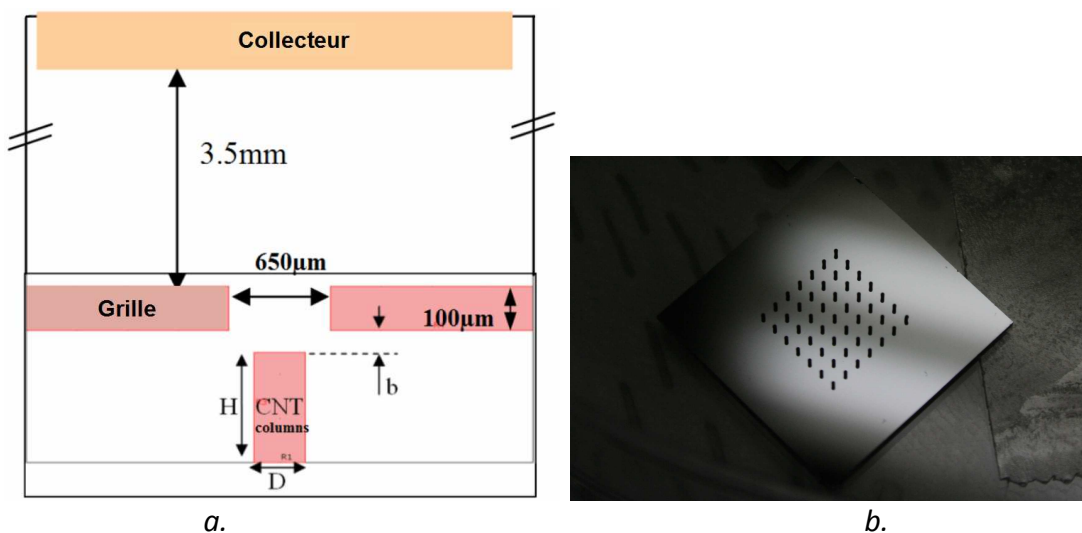


Figure IV-100 : a. Schéma du principe d'extraction avec les dimensions. b. Photographie du substrat où l'on a fait croître la matrice de 7x7 CNT.

Ce substrat est placé dans un montage où la grille est placée avec précision au dessus des CNT (pour obtenir un alignement parfait entre les CNT et la grille d'extraction). Une anode (ou collecteur), fixé à une distance de 3.5mm de la grille, permet de mesurer le courant d'électrons. Le volume entre la grille d'extraction et le collecteur correspond au volume d'ionisation de la future source. Pour permettre aux ions formés d'entrer dans l'instrument, le volume d'ionisation doit obligatoirement se trouver dans un espace à 0V. Un champ dans ce volume modifierait les trajectoires et les énergies des ions nouvellement formés. La *Figure IV-101 a.* montre une vue schématique en coupe de l'assemblage de la version 1 d'extraction des électrons. La *Figure IV-101 b.* montre une photographie du montage installé dans le caisson de mesures d'Ajou University en Corée du Sud.

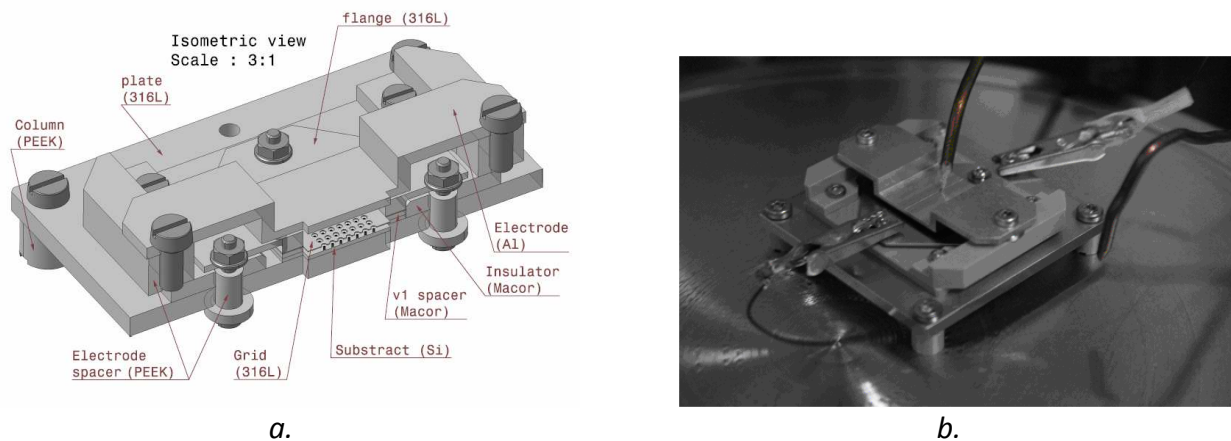


Figure IV-101 : a. Vue schématique de l'assemblage de la version 1 utilisant des CNT colonnes comme émetteur d'électrons. b. Photographie du montage de la version 1 posée dans le caisson à vide à Ajou University en Corée du Sud.

Une variation linéaire du potentiel est appliquée. Deux diamètres de grilles sont disponibles ($500\mu\text{m}$ et $650\mu\text{m}$) et plusieurs distances entre la grille et le haut des CNT sont possibles grâce aux différentes hauteurs des CNT ainsi qu'un jeu d'entretoises de différentes épaisseurs. L'objectif est d'obtenir un courant de l'ordre de $100\mu\text{A}$ sur l'anode en polarisant celle-ci à un potentiel minimum ainsi que la grille de manière à obtenir une énergie des électrons de l'ordre de 100eV .

4.3.2. Mesures

Les courants obtenus sur la Figure IV-102 correspondent aux objectifs mis à part les potentiels du collecteur (1100V) et la grille (360V) qui sont trop élevés.

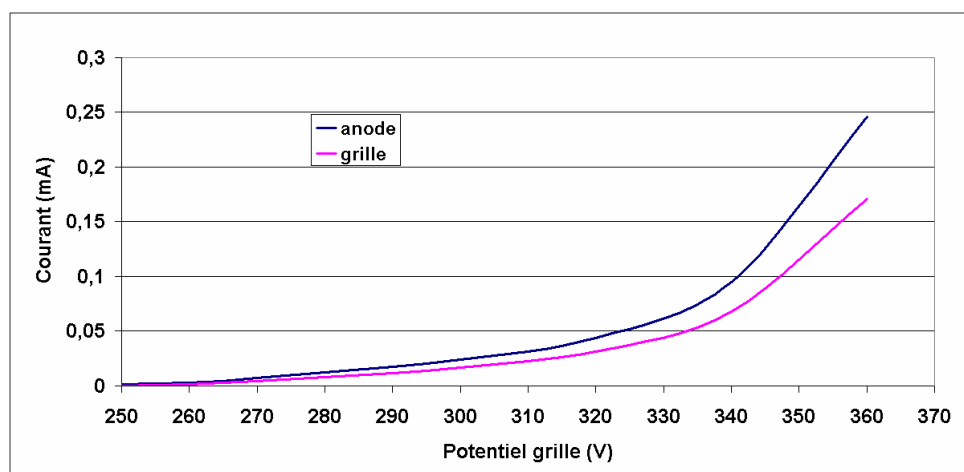


Figure IV-102 : Résultats de variation des courants sur l'anode et la grille d'extraction en fonction du potentiel de la grille lorsque les CNT sont à la masse et l'anode se trouve à un potentiel de $+1100\text{V}$.

Le volume entre la grille et l'anode ne se trouve pas à 0V. Il va falloir modifier le montage pour réduire les potentiels mis en jeu pour réaliser l'extraction des électrons. Il est possible aussi de polariser les CNT à un potentiel négatif de manière à avoir un potentiel nul sur la grille d'extraction. De même, l'anode doit aussi se trouver à un potentiel nul. La *Figure IV-102* montre aussi qu'un fort courant est collecté par la grille d'extraction. Les résultats de simulations ne montrent pas de tels courants sur la grille comme l'illustre la *Figure IV-99*. Un travail de simulation a donc été réalisé afin de comprendre le mode d'extraction des électrons ainsi que les trajectoires des électrons (section suivante).

La notion de stabilité d'extraction des électrons est importante pour une mission spatiale devant durer plusieurs années. En effet, l'instrument doit pouvoir fonctionner pendant plusieurs centaines d'heures. Le fait d'utiliser des CNT comme émetteur d'électrons nécessite de vérifier la stabilité de l'extraction des électrons au cours du temps. Un premier test d'émission d'électrons sur une période de deux heures a été réalisé dont les résultats sont donnés *Figure IV-103*. Le courant augmente mais ne faiblit pas. Au bout de 40 minutes le courant se stabilise autour d'une valeur moyenne avec des fluctuations de l'ordre de 10% ce qui est acceptable pour une source d'ionisation.

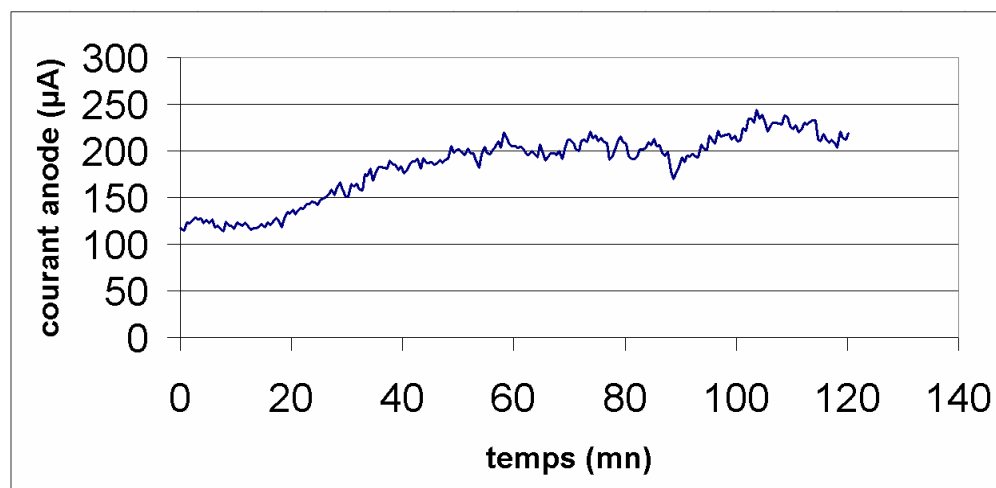


Figure IV-103 : Test de stabilité des CNT obtenu sur 2 heures de mesures du courant sur l'anode.

4.3.3. Interprétation et simulations

Le travail d'interprétation des résultats obtenus lors d'une première campagne de mesures effectuée à Ajou university en Corée du Sud nous a permis d'écrire un article. Celui-ci décrit le dispositif expérimental, sa modélisation et l'interprétation du principe d'extraction des électrons. Cet article a été accepté et va être publié dans le journal Nanotechnology dans les prochains mois (fin 2013).

Multi-scale simulation of electron emission from a triode-type electron source with a carbon-nanotube column array cathode

Joel Becker¹, Nguyen Tuan Hong², Jean-Jacques Berthelier¹, Francois Leblanc^{1*}, Soonil Lee^{2*} and Fabrice Cipriani³

¹ LATMOS-CNRS/IPSL, University of Versailles Saint Quentin, Guyancourt, France

² Division of Energy Systems Research, Ajou University, Suwon 443-749, Korea

³ TEC-EES, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands

* Corresponding authors: francois.leblanc@latmos.ipsl.fr (Francois Leblanc) and soonil@ajou.ac.kr (Soonil Lee)

Abstract. We have designed and fabricated a new type of field electron source for a novel onboard mass spectrometer. The new electron source, which is a field effect emitter in a triode configuration, consists of a CNT-column array cathode and an extraction gate with holes that are aligned concentrically with respect to the cylindrical CNT columns. In a triode mode operation, cathode currents as large as $\sim 420 \mu\text{A}$ have been emitted with an anode-to-gate current ratio of ~ 1.5 . To account for the observed emission characteristics of the new electron source, we have carried out multi-scale simulations that combine a three dimensional (3D) microscopic model in the vicinity of an actual emission site with a two dimensional (2D) macroscopic model that covers the whole device structure. Because the mesh size in the microscopic 3D model is as small as 100 nm, the contributions of the extruding CNT bundle at the top edge of an electron column can be examined in detail. Unlike the macroscopic 2D simulation that shows only small field enhancement at CNT column's top edge, the multi-scale simulation successfully reproduced the local electric field strong enough to emit the measured cathode currents and the electric field distribution that is consistent with the measured anode-to-gate current ratio.

Keywords: Carbon nanotubes, field electron emission, electric field distribution, SIMION, space instrument

PACS: 85.45.Db, 79.60.Jv, 95.55.-n

1. Introduction

Electron emitters are key components of a variety of instruments and sub-systems used in space exploration. Ion thrusters (Micheal et al. 2001) and potential neutralizers (Olsen et al. 1981) are unique applications of electron emitters related to spacecraft propulsion. Electron emitters in onboard scientific instruments to characterize terrestrial, planetary, and cometary atmospheres, such as the COPS (COMetary Pressure Sensor) and the ROSINA (Rosetta Orbiter Spectrometer for Ion and Neutral Analysis)

onboard the ROSETTA spacecraft, and the INMS (Ion and Neutral Mass spectrometer) onboard the CASSINI spacecraft, are more typical applications. The electron drift electric field detector on the MMS (Torkar et al. 2012) and electron beam accelerators (Cambou et al. 1978 and Beghin et al. 1984) are other examples of electron emitter applications, in particular, in the field of magnetospheric and space plasma science.

Traditionally, heated filaments have been a popular option to produce a large-current electron beam, and there is an impressive success record of onboard mass spectrometer with heated filaments. Nevertheless, heated filaments suffer from high power consumption and noisy signal background due to outgassing. Typically, heated filament consumes $\sim 2\text{--}3$ W to produce emitted electron currents of a few hundred μA . Such large power consumption severely limits the operation time of an onboard mass spectrometer because the total electrical energy available to a particular scientific payload is often strongly constrained. Ionization of atoms and molecules outgassed from inadvertently heated parts in the vicinity of hot filaments generates a large background of low energy ions that hinders reliable measurements of the low mass constituents in terrestrial and planetary atmospheres.

Field effect emitters (FEEs) are a viable alternative to heated filaments as an electron source in an onboard mass spectrometer. Field electron emission from cold cathodes can produce large electron-beam currents with very low power consumption and are free from the inadvertent heating problem. Carbon nanotube (CNT) cathodes that are easy and inexpensive to fabricate have recently emerged as the most favored field electron source and have almost completely replaced metallic micro-tips that used to be standard FEEs (Wright et al. 2007 and Cipriani thesis 2006). CNT FEEs are an efficient electron source (Bonard et al. 2001 and Chhowalla et al. 2001) with satisfactory reproducibility and stability over time (Hong et al. 2009), and have already spurred several instrumental applications (Cho et al. 2008 and Ohkawa et al. 2010).

As part of our endeavor to build a novel neutral mass spectrometer that can study thermal and super-thermal constituents in tenuous planetary atmospheres, we have developed a new type of ionization source based on FEEs that consists of an array of CNT columns. On the contrary to a thin and well-focused electron beam produced by a typical ionization source in conventional mass spectrometers, the new design calls for a wide electron beam to utilize more extended ionization volume. A wide electron beam can be fed into an ionization zone by simultaneously operating multiple FEEs without strenuous focusing. Less stringent focusing requirement is advantageous because FEEs can be operated in the configuration of grounded ionization volume while keeping the energy of emitted electrons close to the optimal value for the maximum ionization cross section.

In this work, we have examined the operation characteristics of the first prototype of an electron source for a novel onboard mass spectrometer, which is a CNT column array FEE in a triode configuration. Two main features that are useful to assess the triode structure electron source are the size of cathode current and the ratio between anode and gate currents. Moreover, we have carried out numerical simulations to account for cathode currents as large as ~ 420 μA at the modest gate bias voltage of 360 V by using the SIMION software (Dahl, 2000). To take into account detailed structural aspects of a CNT FEE in sub-micrometer scale, we have used multi-scale approach with an embedded microscopic simulation box. Such a multi-scale simulation has resulted in not only sufficiently large electric field to emit cathode currents in an observed level, but also the local electric field distribution compatible with the observed anode-to-gate current ratio.

2. Experiment

A 7×7 square array of CNT columns were fabricated on a heavily-doped silicon (100) substrate by combining a photolithographic pre-patterning of catalysts that consisted of Fe (3.0 nm) and Al (10 nm) layers with a hot-filament chemical vapor deposition (HFCVD) process for CNT synthesis. Mixture of methane (20 SCCM, SCCM denotes cubic centimeter per minute at STP) and hydrogen (30 SCCM) was used as feedstock at the working pressure of 30 Torr. Filament and substrate temperatures were 2050 and

750 °C, respectively. The dimensions of each cylindrical CNT column are 200 μm in diameter and 380 μm in height. The centre-to-centre spacing between two adjacent columns in the square array is 1.0 mm. Within each column, CNTs are bound together along the length by van der Waals interaction among numerous neighboring CNTs, and only top ends of the outermost CNTs are free to move (please see the Supporting Information).

Field emission test of the CNT-column array cathodes was carried out in a triode configuration by using an electron source assembly designed for the novel onboard mass spectrometer. The assembly was slightly modified to replace a high transparency grid that passes electrons to the ionization zone in the onboard mass spectrometer with an anode as shown in Figure 1(a). Therefore, measured anode currents are good representation of “useful” electrons that can contribute to ionization. A gate electrode to extract field emission electrons from the CNT cathode has 7×7 circular holes that are 650 μm in diameter and aligned concentrically with respect to cylindrical CNT columns. The gate electrode was placed at 500 μm above the silicon substrate, and the anode at 3.5mm above the extraction gate.

The polarization scheme for bias voltages to extract field emission currents are shown schematically in Figure 1(b). The gate potential was varied from +200 to +360 V whereas the CNT-column array cathodes were grounded (0 V) and the anode potential was kept fixed at +1100V. Keithley-237 and Keithley-248 high-voltage source-measure units were used to bias the extraction gate and the anode, respectively, and to measure corresponding currents. Cathode currents were measured by using a Keithley-2000 multimeter. All field emission measurements were conducted in a test chamber at a vacuum of better than 2×10^{-6} Torr.

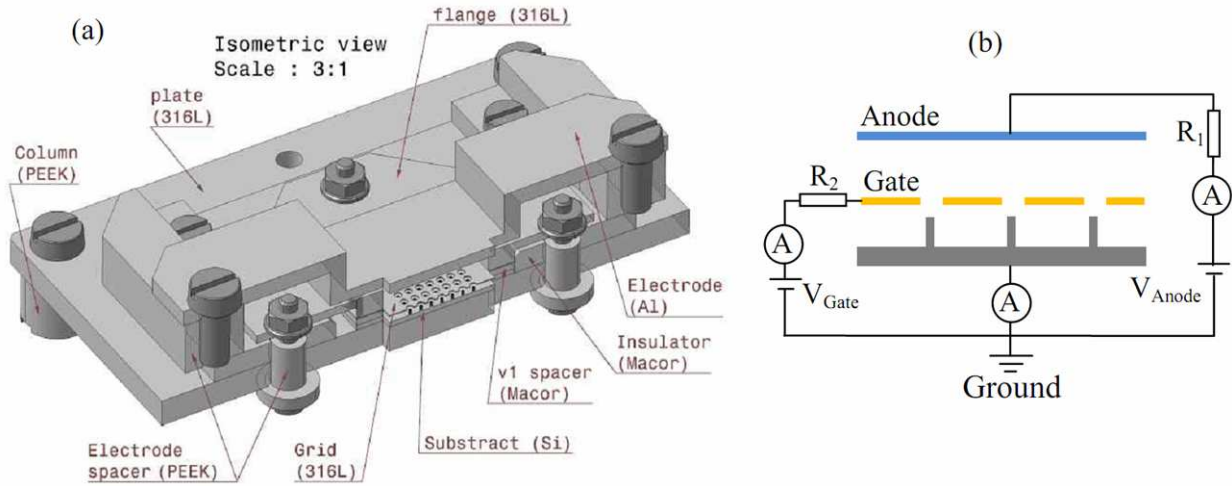


Figure 1 : (a) Perspective view of the electron source assembly and (b) Schematic view of the field electron measurement set-up.

3. Results

Figure 2 shows experimentally measured cathode currents with respect to gate potential. The emission currents is as large as 420 μA at the modest gate potential of 360 V. The measured current-versus-potential (I - V) curve has been transformed into a Fowler-Nordheim (FN) plot that is $\ln(I/V^2)$ versus $1/V$ as shown in the inset of Figure 2. The linear FN plot indicates that the measured currents are field emitted electrons from the CNT-column array cathode, which can be accounted for by the FN theory that deals with quantum tunneling of electrons into vacuum:

$$I = A \frac{1.42 \times 10^{-6}}{\phi} (\beta_E V)^2 \exp\left(\frac{10.4}{\sqrt{\phi}}\right) \exp\left(-\frac{B \phi^{1.5}}{\beta_E V}\right)$$

where I (A) is the emission current, A (m²) is the effective emitter area, V (V) is the gate potential, β_E (m⁻¹) is the field factor, ϕ (eV) is the work function, and constant B is $6.44 \times 10^9 \text{ Vm}^{-1}\text{eV}^{-1.5}$. The product $\beta_E V$ is the strength of local electric field E_{loc} at the emission sites. For example, β_E is simply $1/d$ in the case of diode-configuration field emission; d is the cathode-anode distance. On the contrary, it is not straightforward to deduce β_E of the triode case from the geometrical parameter values. However, we can deduce the value of β_E in the triode case from a linear regression analysis of the FN plot to the functional form $\ln(I/V^2) = a - b(1/V)$. The deduced β_E value corresponding to the best-fit curve in the inset is $18 \mu\text{m}^{-1}$ when we assume work function ϕ as 5 eV (Gröning et al. 2000), and, accordingly, the value of E_{loc} is $6480 \text{ V}/\mu\text{m}$ at 360 V. We note that these values are three orders of magnitude larger than those in the diode configuration with an equivalent inter-electrode gap.

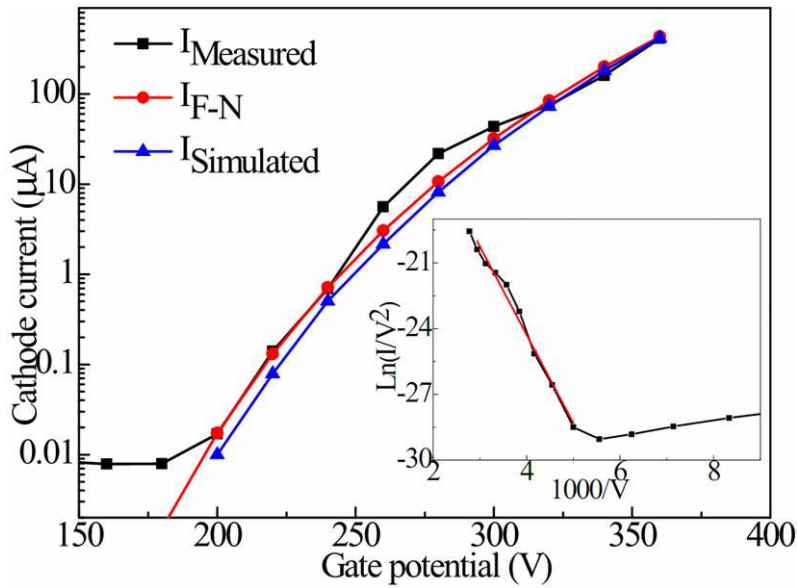


Figure 2 : The experimentally measured cathode currents (I_{measured} , black square), the best-fit FN currents (I_{FN} , red circle), and the simulated currents ($I_{\text{simulated}}$, blue triangle) with respect to gate potential. Inset shows FN plot of the measured currents and the best-fit curve to Eq. (1). The parameter values extracted from the FN-curve fitting are used to calculate I_{FN} . $I_{\text{simulated}}$ is estimated according to Eq. (1) by using the maximum strength of local electric field at each gate bias voltage while assuming 45° inclination of an electron-emitting CNT bundle (See the discussion in the later section).

Figure 3 shows experimentally measured gate (I_A) and anode (I_g) currents with respect to gate potential. Basically, cathode currents are divided into gate and anode currents, and only anode currents can contribute to ionizing specimens of terrestrial, planetary, and cometary atmospheres. As shown in Figure 3, the I_A/I_g ratio is 2.1 at the gate potential of 220 V, and steadily decreases down to 1.4 at 320 V. However, the I_A/I_g ratio remains about the same at 1.4 up to 360 V, which indicates that about 60% of the electrons emitted from the cathode can be utilized in the ionization zone of the onboard mass spectrometer with

the current electron-source design. To increase ion-generation efficiency of onboard mass spectrometers, it is important to make the I_A/I_g ratio as large as possible.

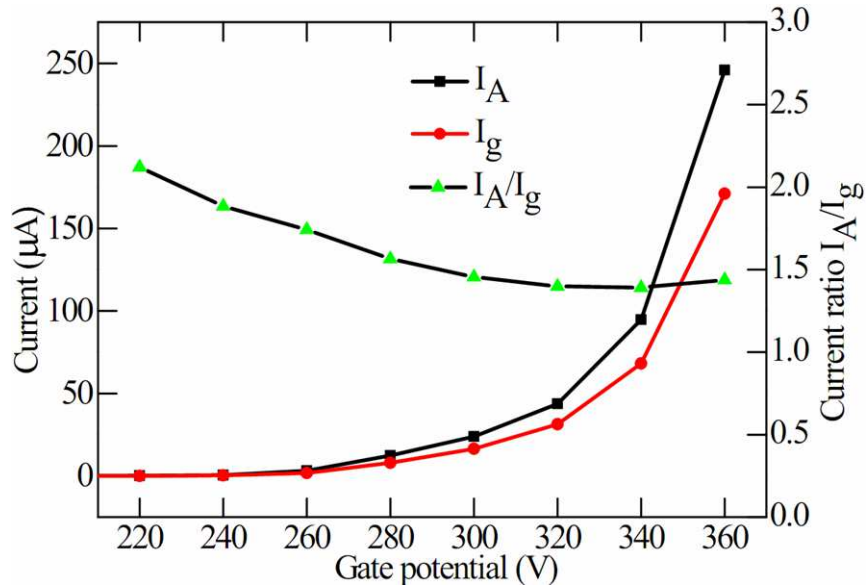


Figure 3 : The anode (I_A , black square) and the gate (I_g , red circle) currents with respect to gate potential, and the variation of the anode-to-gate current ratio (I_A/I_g , green triangle).

4. Discussion

To account for the measured high emission currents and the I_A/I_g ratio, we performed numerical simulations to map electric field distribution around a CNT column. As shown in equation (1), the emission currents are an exponential function of the local electric field, and, therefore, not only the emission current size, but also the I_A/I_g ratio depend mostly on electric field distribution in the vicinity of emission sites that coincide with the maximum local field location.

Figure 4 shows the variation of the electric field with respect to the position along a CNT column, which we deduced from the macro-scale two dimensional (2D) simulation with a mesh size of $\sim 1 \mu\text{m}$ (See the Supporting Information). As expected, the maximum electric field occurs at the top edge of a CNT column. However, the maximum electric field strength is only $\sim 8 \text{ V}/\mu\text{m}$ that is about 800 times smaller than what we estimated from the FN plot.

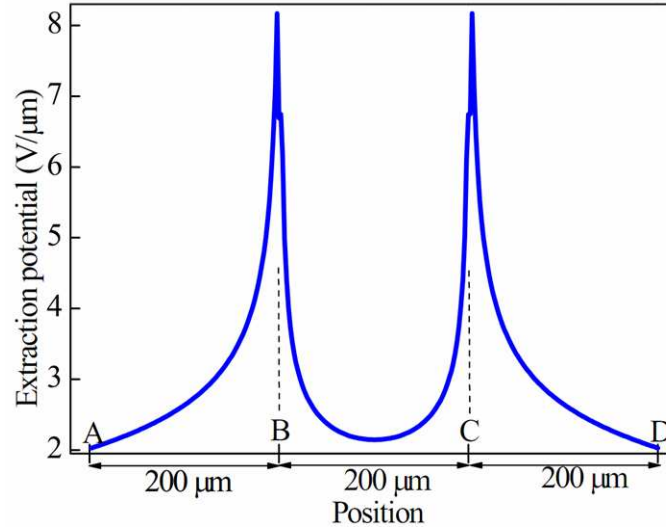


Figure 4 : Variation of the electric field strength along a CNT Column at the gate potential of 360V and the anode potential of 1100V. Intervals AB and CD, and BC correspond to the directions along the cylindrical side and top surfaces, respectively. B and D denote the top edge of a CNT column. (See Figure S1 in the Supporting Information)

The occurrence of the maximum electric field at the top edge is due to field enhancement corresponding to macroscopic geometry of a CNT column. However, such macroscopic field enhancement is insufficient to emit the measured cathode currents. CNT bundles that stick out of the top surface of a CNT column has to be taken into account as typically done in modelling CNT devices (Bonard et al. 2001 and Le Sech thesis 2010). Extra field enhancement that can make the local electric field at emission sites, E_{loc} , about 800 times larger than the maximum field in Figure 4 is feasible because the extrusion of CNT bundles can be tens of micrometers while the typical diameter of CNT bundles is only tens of nm. To confirm this additional field enhancement, we carried out multi-scale simulations, in which a microscopic computation box for a three dimensional (3D) model is embedded in the macroscopic model (See Figure S2(a) in the Supporting Information). A mesh size was 100 nm for the small computation box representing the vicinity of an extruding CNT bundle at the top edge of a CNT column. For the microscopic 3D simulation, the electric potential map computed by the macroscopic model is used to define a fictitious boundary surface (See the Supporting Information).

Figure 5(a) shows the potential map corresponding to an extruding CNT bundle with the extrusion length of 8 μm and the inclination angles of 45° . The diameter of the CNT bundle is assumed to be 100 nm, identical with the mesh size. There is a substantial modification in the electric potential distribution in the vicinity of the extruding CNT bundle, whereas the change is negligible at distances larger than tens of micrometers. As shown in Figure 5(b), the deviation of equipotential surfaces calculated by the multi-scale simulation including the extruding CNT bundle from those by the macroscopic model without CNT-bundle extrusion is not significant away from the CNT bundle. We repeated similar multi-scale simulations for vertical (0°) and horizontal (90°) orientations of a CNT bundle having the same dimensions, and confirmed similar modifications of electric potential maps; electric potential change is large in the vicinity of the CNT bundle, but negligible far away from the CNT bundle (See the Supporting Information).

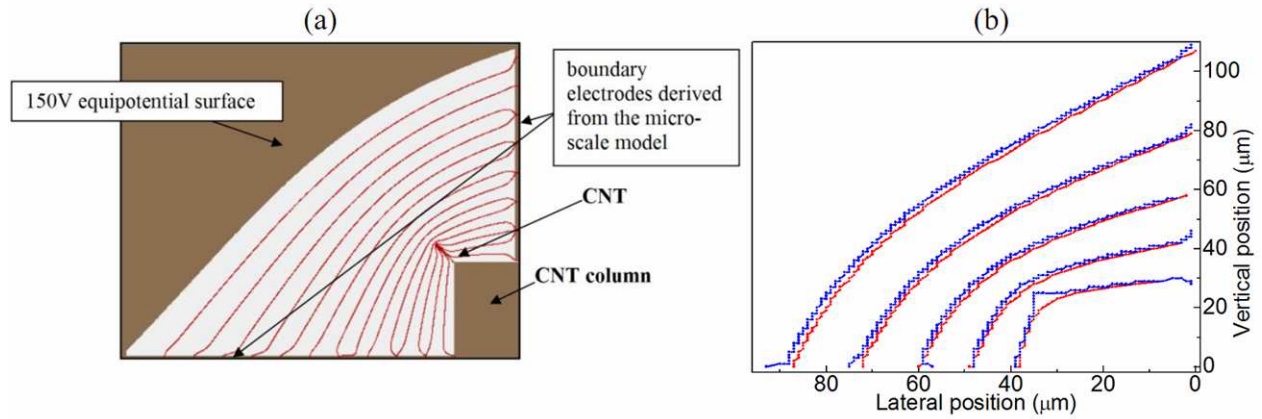


Figure 5 : (a) Electric potential distribution according to the micro-scale 3D model with a 45°-inclined CNT bundle. The length and diameter of the extruding CNT bundle are assumed to be 8 μm and 100 nm, respectively. Equipotential surfaces (red line) are shown from 10 to 140 V in steps of 10 V. (b) Comparison of equipotential surfaces calculated by the multi-scale simulation including the extruding CNT bundle (blue) with that by the macroscopic model without CNT-bundle extrusion (red). Equipotential surfaces correspond to 20 to 100 V in steps of 20 V at the gate potential of 260V for the grounded cathode.

Significant modification in electric potential in the vicinity of the extruding CNT bundle in the microscopic 3D model results in a large enhancement of electric field at CNT bundle's tip. For example, the maximum electric field is as large as 2000 V/μm at the gate potential of 360 V as shown in Figure 6 when there is a CNT bundle that is 100 nm in diameter, 8 μm in extrusion length, and inclined by 45°. We note that all the maximum electric field calculated from the microscopic 3D model has the same order of magnitude regardless of the inclination angle because field enhancement is determined mostly by the ratio between the length and diameter of the extruding CNT bundle. The maximum electric field of 2000 V/μm is only 3.22 times smaller compared to the local field E_{loc} deduced from the FN plot. We attribute the factor of 3.22 difference (underestimation) in the magnitude of the maximum electric field to the exaggerated diameter that we use in the microscopic 3D model. Because of the limited memory size and non-adaptive mesh generation of the SIMION program, the diameter of a CNT bundle is assumed to be identical with the mesh-size limit of 100 nm, whereas the actual size of CNT bundles is typically a few times smaller [16]. The linear variation of the electric field magnitude with respect to the gate potential in Figure 6 is consistent with a constant field factor, $\beta_E = 5.0 \mu\text{m}^{-1}$, that is 3.6 times smaller than that deduced from the FN plot.

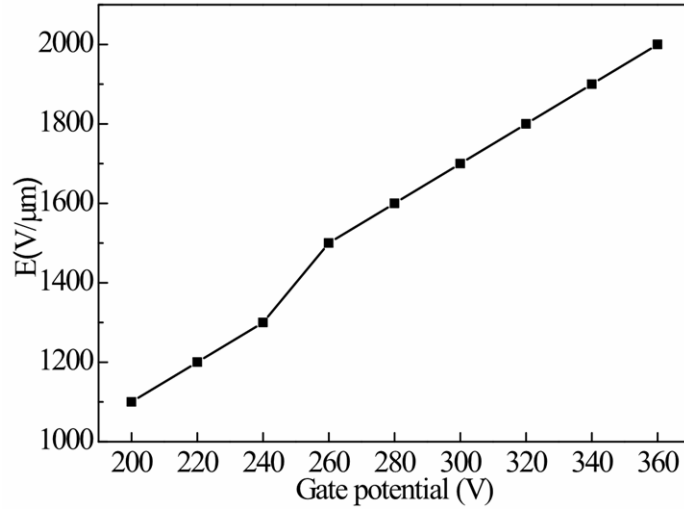


Figure 6 : The maximum electric field magnitude deduced from the multi-scale simulation with respect to the gate potential. An extruding CNT bundle is included in the microscopic 3D model. The length, diameter, and inclination angle of the extruding CNT bundle are assumed to be 8 μm , 100 nm, and 45°, respectively. The maximum electric field occurs at the tip of the extruding CNT bundle.

Contrary to the reasonable agreement between the magnitudes of the simulated and FN-plot-derived electric field, which results in comparable simulated and measured cathode currents, regardless of the inclination angle, the ratio between the measured anode and gate currents I_A/I_g has prominent inclination-angle dependence. As shown in Figure 7, the deviations of emitted-electron trajectories in response to different inclination angles are substantial so that the portion of the emitted electrons intercepted by the gate varies appreciably to result in large change in I_A/I_g ratios. For example, a large portion of the emitted electrons is intercepted by the gate if the CNT bundle orientation is horizontal. In this case only ~10% of the emitted electrons reach the anode. On the other hand, the portion of the emitted electrons intercepted by the gate is very small if the CNT bundle orientation is vertical, and the anode currents can be as large as 94-98% of the cathode currents. The discrepancy between the I_A/I_g ratios calculated in these two extreme cases and those experimentally measured is astounding; the average of the experimentally measured I_A/I_g ratios in Table 1 is 1.50. However, calculated I_A/I_g ratios corresponding to an inclination angle of 45° are consistent with the experimentally measured ones. The magnitude of the calculated I_A/I_g ratios corresponding to the inclination angle of 45° is comparable with that of the measured I_A/I_g ratios, both I_A/I_g ratios decrease monotonically with respect to gate-potential increase, and the average of the calculated I_A/I_g ratios is 1.56 (See Table 1).

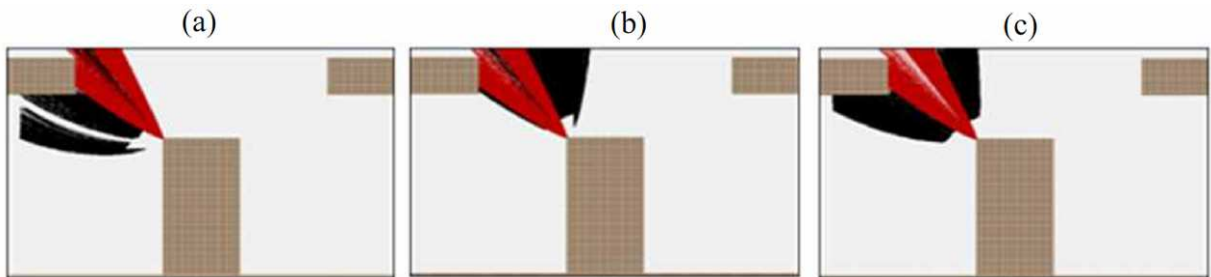


Figure 7 : Variations in the simulated electron trajectories (black) corresponding to different inclination angles of the extruding CNT bundle in the multi-scale model that includes the microscopic 3D simulation box within the 2D macro model: (a) horizontal, (b) vertical, and (c) 45°-inclined CNT bundles, respectively. The electron trajectory (red)

corresponding to the macroscopic 2D model without CNT extrusion is shown for comparison. In the macroscopic model, electrons are emitted from the top edge of a CNT column.

Table 1 : Comparison of the measured and calculated ratio of the anode current (I_A) to the gate current (I_g). The anode and gate currents are calculated from the multi-scale simulation with an extruding CNT bundle that is 100 nm in diameter and 8 μm in extrusion length. The CNT bundle is assumed to be horizontal (90°), 45° inclined, and vertical (0°).

Gate potential (V)	Measured I_A/I_g	I_A/I_g calculated at three inclination angles		
		90°	45°	0°
260	1.74	0.08	1.76	55
280	1.56	0.09	1.69	44
300	1.45	0.10	1.64	35
320	1.40	0.10	1.60	29
340	1.39	0.11	1.36	24
360	1.44	0.12	1.29	16

Figure 7 shows that the electron trajectories produced by the macroscopic 2D model is very different from those by the multi-scale model. The large discrepancy in I_A/I_g ratios between measurements and macroscopic 2D modelling indicates that the electron trajectories in the macroscopic simulation are not representative of the actual electron beams emitted from an extruding CNT bundle. Indeed, close to the extruding CNT bundle, emitted electrons have a low energy, and their trajectories are bound to be sensitive to the details of electric field distribution. As shown in Figure 5(a), there is a substantial electric-potential change in the vicinity of the extruding CNT bundle. Therefore, the corresponding electric field distribution in the multi-scale modelling is completely different from that in the macroscopic model, which is inadequate to account for the experimentally measured I_A/I_g ratios.

5. Conclusion

In the course of the development of a novel onboard mass spectrometer to measure thermal and super thermal neutral constituents in planetary upper atmospheres, we have successfully designed and built a first prototype of a new FEE source that consists of a 7×7 CNT-column array and an extraction gate with holes that are concentrically aligned with respect to the cylindrical CNT columns. The operation of the new electron source in triode configuration produced the cathode current as large as 420 μA at the gate potential of 360 V. Moreover, the anode current of 100 μA , which is the design target of the electron source, can be realized at the gate potential of 340 V.

We have found that ideal CNT columns are incapable of producing the experimentally observed emission characteristics of the new electron source. The macroscopic 2D modeling that encompasses the whole electron source shows field enhancement at the top edge of a CNT column, but the strength of maximum electric field is ~ 800 times too small to emit experimentally measured cathode currents. On the contrary, extruding CNT bundles located at the top edge of CNT columns is a realistic and appropriate model that can account for the measured emission currents, quantitatively. We note that the HFCVD-synthesized CNTs grow upward to result in quasi-vertical alignment because of the steric hindrance among crowded CNTs. However, there is no hindrance to outward tilting of CNTs in the outermost layers.

Numerical simulation to map electric potential distribution and to mimic electron beam trajectory is a common tool to explain and to optimize the operation of a FEE-type electron source. However, when the operation of a macroscopic FEE-type electron source depends on the sub-micrometer scale features, the numerical simulation is not straightforward because the problems such as limited memory size and non-

adaptive meshing prohibits the use of sufficiently fine mesh for the entire device. To resolve this problem, we have carried out a multi-scale simulation that combine a three dimensional (3D) microscopic model in the vicinity of an extruding CNT bundle with a two dimensional (2D) macroscopic model that covers the whole device structure. Such multi-scale simulations have been very successful in reproducing the local electric field strength that is compatible with the measured cathode currents and the electric field distribution that is consistent with the measured anode-to-cathode current ratios. Success of multi-scale simulation is important for further development of electron sources, because quantitative simulation of the trajectories of FEE electrons can be utilized in fine-tuning profile and energy of electron beams that enter the ionization zone of an onboard mass spectrometer.

Acknowledgments

French side of this work was supported by the PHC STAR 2011 and 2012 program of the French Ministry of Foreign Affairs (Project No: 25833WM), and the French Space Agency CNES (project No: R-S11/SU-0003-052). Korean side of this work was supported by the Basic Science Research Program through the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Ministry of Education (NRF-2009-0094046), and the STAR 2011 program through the NRF funded by the MEST.

Supplementary data for
“Multi-scale simulation of electron emission from a triode-type
electron source with a carbon-nanotube column array cathode”

Joel Becker¹, Nguyen Tuan Hong², Jean-Jacques Berthelier¹, Francois Leblanc^{1*}, Soonil Lee^{2*} and Fabrice Cipriani³

¹ LATMOS-CNRS/IPSL, University of Versailles Saint Quentin, Guyancourt, France

² Division of Energy Systems Research, Ajou University, Suwon 443-749, Korea

³ TEC-EES, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands

* Corresponding authors: francois.leblanc@latmos.ipsl.fr (Francois Leblanc) and soonil@ajou.ac.kr (Soonil Lee)

1. As-grown CNT-column array
2. Multi-scale Simulation
3. Electron Beam Trajectory and Anode-to-Gate Current Ratio

1. As-grown CNT-column array

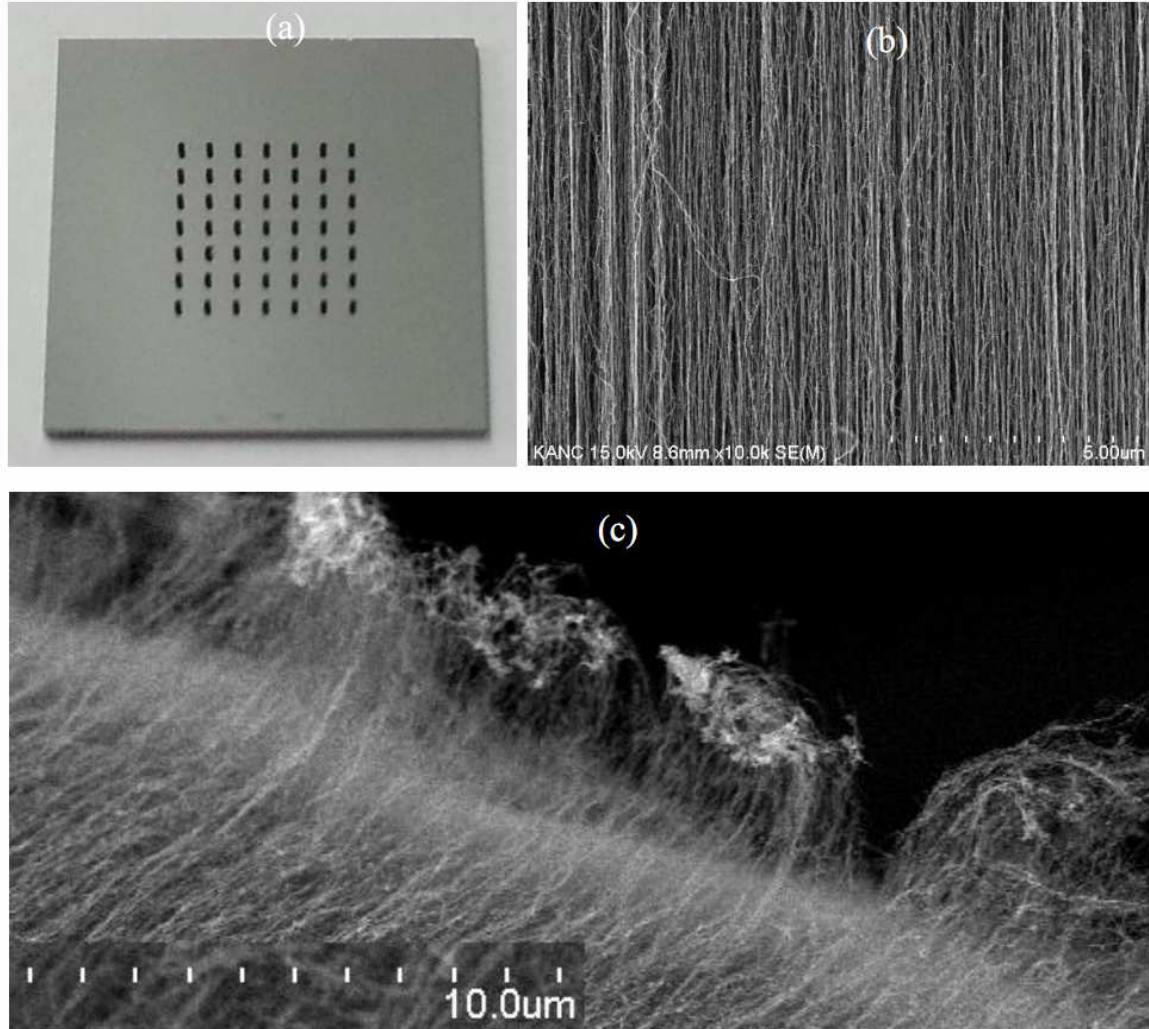


Figure S1 : (a) An optical microscope image of a 7×7 CNT-column array; (b) a typical SEM image of CNT-column's side surface showing quasi-vertical alignment of CNTs; and (c) a high resolution SEM image of typical CNT-column's top edge; there is extrusion of CNT bundles above a nominal top surface of the CNT columns.

2. Multi-scale Simulation

Due to memory limitation and non-adaptive meshing process of the SIMION program, it is impossible to build a three dimensional (3D) numerical model of the entire ion source (typical dimensions ~ 10 mm) with a mesh size small enough to correctly model the electric field at the scale of tens of nm, corresponding to typical diameter of CNT bundles. We overcame this difficulty by performing multi-scale numerical modelling in 2 successive steps.

[Step 1] Simplify the geometry to perform a macro-scale two dimensional (2D) simulation with a mesh size of $\sim 1 \mu\text{m}$ from the substrate surface, where the bottom of a CNT column is, to the anode; see Figure S2. A cylindrical computation box encompasses a single pair of a CNT column and an extraction gate. For symmetry reasons, the potential around a CNT column surrounded by four others can be modelled using a

cylindrical computation box with the Neumann condition at the cylinder boundary surface. This model is representative of all the CNT columns that work in parallel and is useful to compute the large scale electric field along the external surface of a CNT column and to determine the location where the maximum electric field occurs.

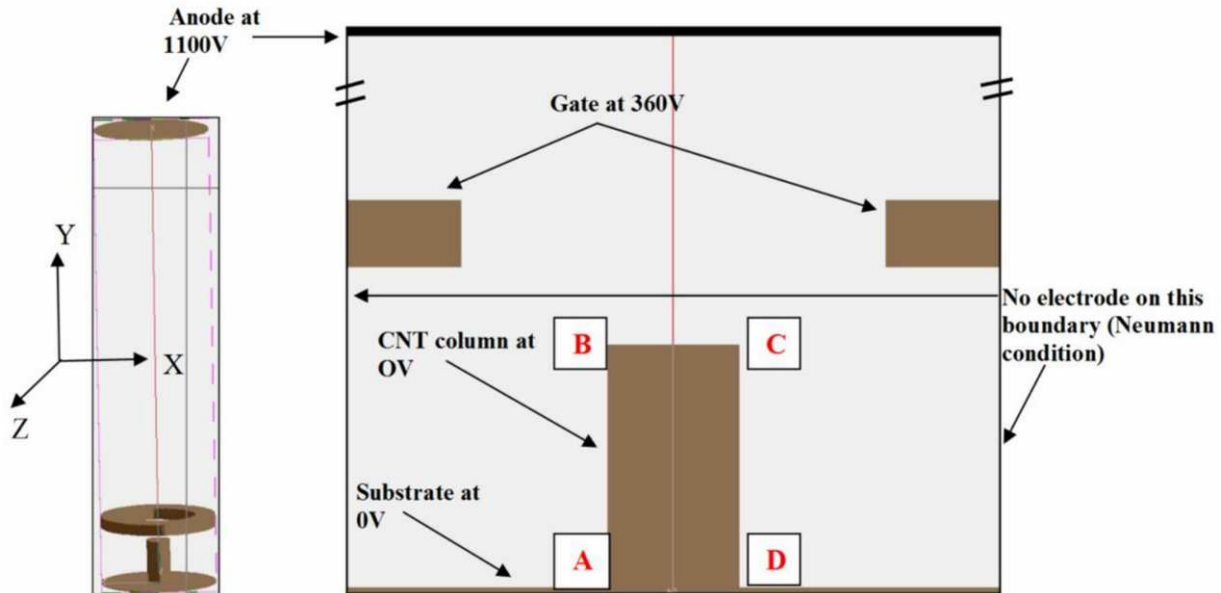


Figure S2 : (a) A cylindrical 2D computation box that covers the whole structure of a structural unit: a CNT column and an extraction gate. (b) A cross-sectional schematic of the CNT column and the extraction gate with a hole. A, B, C, and D denote edges at the bottom and top of a CNT column.

[Step 2] Use two hierarchical models with different mesh sizes: a macro-scale 2D model and a micro-scale 3D model. A micro-scale 3D model that is limited to a small computation box in the vicinity of the maximum electric field with a mesh size of 100 nm is embedded in the macro-scale model. Potential maps obtained with the macro-scale model are used to define proper boundary conditions (surfaces and potentials) for the micro-scale computation box. Within this box, CNT bundles with random position, length and inclination direction can be represented, and the corresponding microscopic potential maps can be computed. Since the mesh size is only a few times larger than the typical diameter of CNT bundles, more realistic values of the maximum electric field at the tip of a CNT bundle can be deduced.

Figure S3 shows the microscopic 3D simulation box embedded in the macroscopic simulation model and simulation results corresponding to three different orientations of a CNT bundle at the edge of a column. We assume that the extrusion length of a CNT bundle is 8 μm , and the inclination angles are 0° (vertical), 45° , and 90° (horizontal). The diameter of a CNT bundle is assumed to be 100 nm, identical with the limit mesh size. Because of the exponential dependence of emission current on electric field, emission currents are dominated by the contributions from extruding CNT bundles at column's edge where the macroscopic electric field peaks. Therefore, it is physically interesting and practical to investigate electric potential distribution for different combinations of length, diameter, and inclination angle of a CNT bundle located at the top edge of a CNT column.

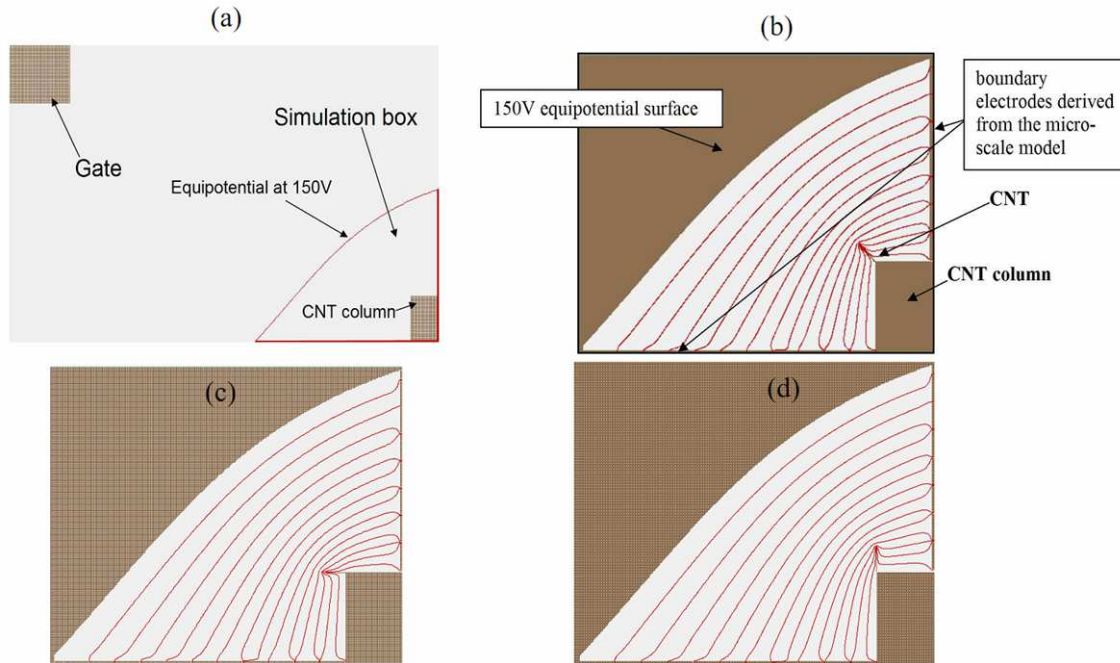


Figure S3 : Cross-sectional view showing the microscopic simulation box with respect to the part of the macroscopic simulation box in the vicinity of the edges of a CNT column and an extraction-gate hole (a). Simulation results from the microscopic 3D model with 45° inclined (b), horizontal, and (c) vertical CNT bundles, respectively. Equipotential surfaces (red line) are shown from 10 to 140 V in steps of 10 V.

A key element of the microscopic 3D model is a fictitious boundary surface that we select to coincide with an equipotential surface obtained from the macroscopic 2D model and to maximize the useful volume of the microscopic 3D simulation box. The addition of an extruding CNT bundle at the top edge of a column results in an electric potential map which is different from that of the macroscopic 2D model. However, the change in electric potential distribution is insignificant at the distance of tens of micrometers from the tip of an extruding CNT bundle. The fictitious boundary in Figures S3(b)-(d) are located at 46 μm from the CNT bundle tip. The potential of this fictitious boundary changes in response to a gate bias voltage and becomes 150 V at the gate voltage of 360V. The potential map produced by the multi-scale simulation including the microscopic 3D simulation model shows good agreement with that of the 2D macroscopic simulation at distances larger than tens of micrometers from the CNT bundle tip (See the main text). Such resemblance between equipotential surfaces between two simulations is a strong evidence for the validity of our multi-scale simulation. Substantial change in electric potential in the vicinity of the extruding CNT bundle in the microscopic 3D model results in a large electric field at CNT bundle's tip, which is the same order of magnitude with the local field E_{loc} deduced from the FN plot (see the main text) regardless of the inclination angle.

3. Electron Beam Trajectory and Anode-to-Gate Current Ratio

Electron beam trajectories are simulated by using electric field distributions that we deduce from the electric potential maps in the macroscopic 2D model without CNT extrusion and the multi-scale model including an extruding CNT bundle. In the case of multi-scale modelling, we firstly divide the external surface of an extruding CNT bundle into surface elements dS . Secondly, electric field perpendicular to each dS is determined. Thirdly, corresponding electron currents leaving each surface element dS are calculated according to the Fowler-Nordheim (FN) theory. Fourthly, we trace trajectories of electron beams leaving each dS , which are properly weighted by the FN equation, to its termination at either the gate or the

anode. Finally, we add all the electron beam currents to estimate the gate and anode currents. For quantitative estimation of the gate and anode currents, we assume that identical CNT bundles are located along the top edge of a CNT column. The spacing between two adjacent bundles is taken to be twice of the extrusion length to avoid the shielding effect (Spindt et al. 1976).

4.4. Deuxième version du montage d'extraction

Après avoir étudié le mode d'extraction des électrons à la surface des CNT, une nouvelle géométrie d'extraction a été adoptée. En effet, les électrons émis principalement sur les bords des CNT vont directement sur la grille après extraction (section 4.3 du chapitre IV). Le moyen d'éviter ce phénomène consiste à modifier la variation du champ à la surface des CNT de manière à maximiser celui-ci au milieu de la surface émettrice comme le montre la *Figure IV-104.b*. Pour obtenir cette variation, nous plaçons une grille sur une surface plane de CNT. Cette grille aura le même potentiel que les CNT. Ensuite se placent une ou plusieurs grilles dans le but d'extraire les électrons comme le montre la *Figure IV-104.a*. La grille posée sur les CNT a pour effet de focaliser les électrons depuis l'extraction et évite ainsi que les électrons n'entrent en collision avec la grille d'extraction.

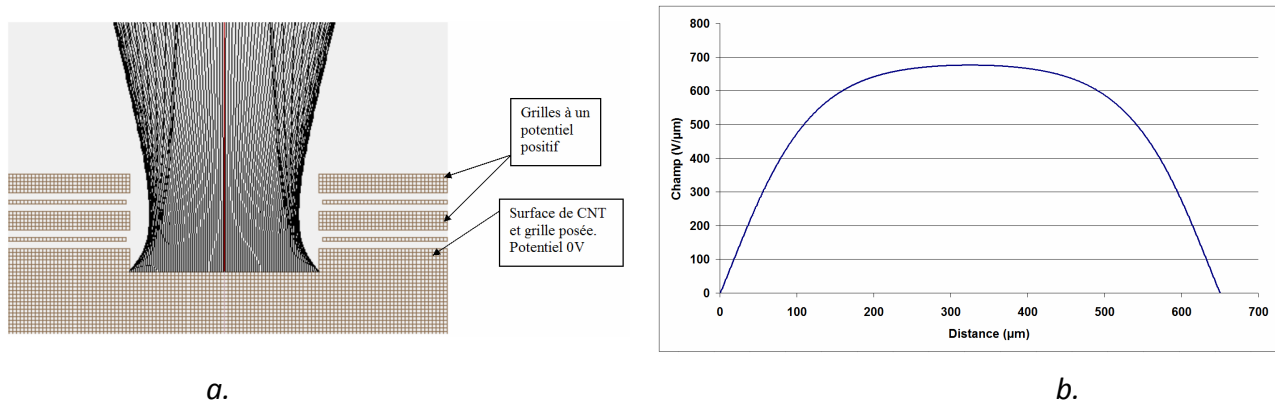


Figure IV-104 : a. Simulation d'une surface de CNT où est posée une grille de même potentiel que les CNT. Une ou plusieurs grilles à des potentiels positifs jouent le rôle de grille d'extraction. Le fait d'avoir une grille posée sur les CNT permet d'obtenir l'équivalent d'une lentille de focalisation. b. Variation du champ à la surface des CNT avec un trou de 650µm de diamètre.

Un nouveau modèle est défini à partir de ce principe d'extraction.

4.4.1. Description

La surface du substrat fait toujours 15x15mm, il est recouvert d'une surface de CNT qui fait généralement 250µm de haut. Ce substrat est placé dans un montage où les grilles sont empilées comme le montre la *Figure IV-105.b*. Les CNT sont polarisés à un potentiel négatif pour obtenir des potentiels nuls sur le reste du montage. La *Figure IV-105.a* montre le principe du montage où la grille G0 est au même potentiel que les CNT et joue le rôle de focalisation des électrons. La grille G1 joue le rôle de grille d'extraction. L'anode est une grille composée de barreaux en cuivre d'une transparence de 80% qui permet d'avoir un volume à champ nul entre l'anode et le collecteur. Ce volume est défini comme le volume d'ionisation. Plusieurs changements de paramètres sont à nouveau possibles de manière à optimiser le courant d'extraction sur le collecteur.

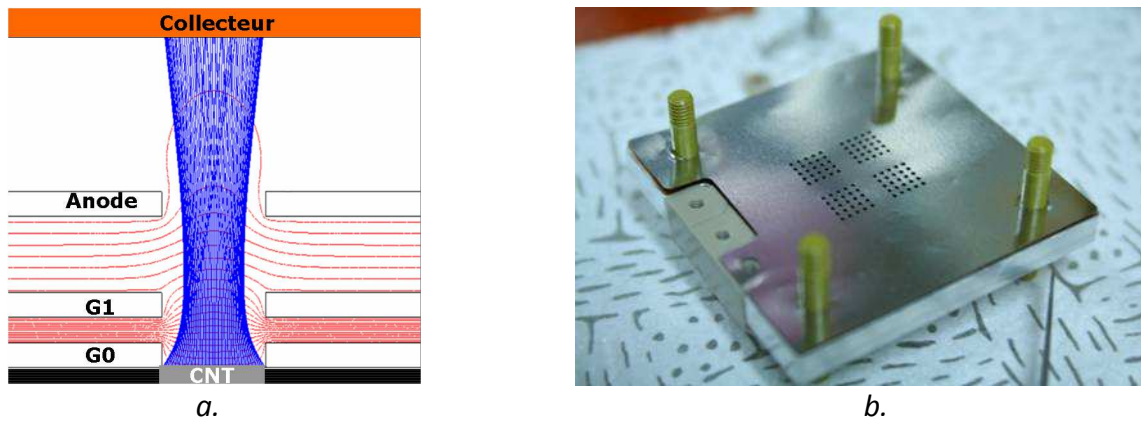


Figure IV-105 : a. Schéma du principe d'extraction des électrons utilisant une surface plane de CNT, une grille d'extraction et une grille de focalisation. b. Photographie de la version 2 du montage où est montrée la grille d'extraction.

4.4.2. Mesures

La mesure de courant se fait en fonction de la variation du potentiel des CNT et de G0 qui est négatif. Le courant est mesuré sur les CNT, sur l'anode et sur le collecteur. La Figure IV-106 donne l'un des premiers résultats obtenus en Corée du Sud.

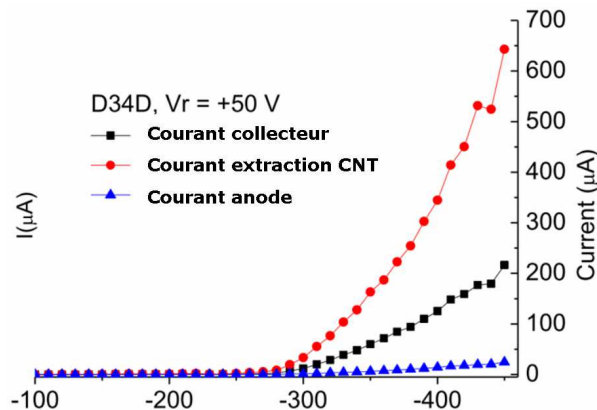


Figure IV-106 : Résultat des courants obtenus sur l'anode et le collecteur pour un courant d'extraction des CNT donné.

Le courant obtenu sur le collecteur est de $\sim 200 \mu A$ pour un potentiel des CNT de -450V et un potentiel de l'anode de +50V. L'énergie des électrons dans le volume d'ionisation est de 400eV. Cette énergie est encore trop élevée mais le courant obtenu est deux fois plus important que nos objectifs. L'énergie des électrons est alors d'environ 310eV pour un courant de $100 \mu A$ sur le collecteur. Le volume d'ionisation n'est pas nul car le potentiel de l'anode est de +50V. Une solution envisageable consiste à décaler tous les éléments entre les CNT et l'anode de -50V pour obtenir un volume d'ionisation à 0V. Une optimisation est en cours afin de trouver le meilleur jeu de paramètres pour l'extraction.

4.4.3. Vers un modèle final

Une nouvelle évolution du montage est en cours de fabrication. Jusqu'à présent, le substrat était déposé sur l'assemblage et fixé par l'empilement. Ceci n'est pas possible dans le cadre d'une mission spatiale. Les vibrations causées par le décollage de la fusée peuvent détruire les CNT dans le cas d'un montage pas assez rigide mécaniquement. La solution consiste alors à percer le substrat pour le visser au montage. Les paramètres d'épaisseurs et de distances entre les éléments sont figés à partir des résultats de l'assemblage précédent et une optique supplémentaire permettant de réaliser une mesure de la distribution en énergie est ajoutée (le montage reprend le dispositif de la *Figure IV-105.a*). La *Figure IV-107* montre une vue schématique du futur assemblage.

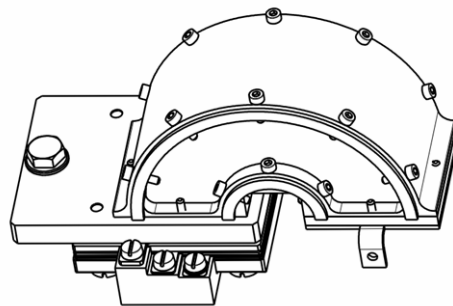


Figure IV-107 : Schéma de l'assemblage en cours de fabrication ; le substrat est percé sur un dispositif de mesure d'énergie et est fixé en sortie du collecteur.

Le collecteur dispose d'un trou circulaire d'un diamètre de 3mm ouvrant ainsi le passage aux électrons pour aller dans l'analyseur en énergie. L'analyseur en énergie est formé de quatre électrodes, deux de formes cylindriques de rayon de courbure différents et les deux autres en forme d'anneau pour fermer les bords de l'analyseur. Le fonctionnement de l'analyseur est expliqué section 3.6 du chapitre III. La mesure du courant sur le collecteur en sortie de l'analyseur en fonction du balayage en potentiel de l'analyseur en énergie nous permettra de déterminer la distribution en énergie des électrons dans le volume d'ionisation. Ce dispositif sera monté en août 2013 et testé au LATMOS (travail hors thèse). Il nous permettra de caractériser entièrement le principe d'extraction de ce montage.

4.5.Résumé

Notre collaboration avec le professeur Lee, le docteur Nguyen Tuan et la R&T CNES de 2011 à 2013 nous a permis de définir, d'étudier et de converger vers un modèle d'extraction d'électrons basé sur l'utilisation de nanotubes de carbone (CNT) servant de source d'ionisation pour NIMEIS. Le premier montage, formé d'une matrice de 7x7 CNT d'un diamètre de $\sim 250\mu\text{m}$, une hauteur de $\sim 500\mu\text{m}$ et espacés de 1mm, utilise le principe d'extraction par émission d'effet de champ en plaçant une grille formée de trous de forme circulaire positionnée à quelques centaines de μm du haut des CNT (section 4.3 du chapitre IV). En créant une différence de potentiel entre la grille et les CNT, les électrons sont extraits des CNT.

Les résultats montrent que les courants obtenus sur le collecteur ne sont pas assez importants par rapport aux courants extraits. De plus, les potentiels d'extraction sont trop élevés (360V pour

la grille d'extraction et 1100V pour le collecteur) car l'énergie des électrons doit être de l'ordre de 150eV pour une probabilité maximale d'ionisation. L'étude du premier assemblage par simulation nous a montré comment sont extraits les électrons et surtout quelles sont les trajectoires des électrons (section 4.3.3 du chapitre IV). En effet, l'effet de pointe du bord des CNT entraîne une extraction des électrons uniquement sur les bords des surfaces composées de CNT, ces électrons ayant tendance à impacter la grille d'extraction au lieu d'atteindre le collecteur. Une amélioration du concept d'extraction qui utilise une surface plane de CNT et une grille au contact des CNT pour focaliser les électrons a permis d'améliorer les résultats du courant obtenu sur le collecteur (section 4.4 du chapitre IV). L'énergie moyenne des électrons est encore un peu élevée (~300eV pour un courant de 100 μ A) mais l'optimisation des paramètres de l'assemblage vont nous permettre d'atteindre nos objectifs, à savoir de réduire l'énergie des électrons.

Une première étude de la géométrie de la source d'ionisation a été réalisée et est présentée sur la *Figure IV-108*.



Figure IV-108 : Vue schématique de la future source d'ionisation utilisant des CNT comme émetteurs d'électrons.

Plusieurs assemblages d'extraction d'électrons sont fixés sur les parois de la source d'ionisation. L'émission d'électrons se fait perpendiculairement aux trajectoires d'entrée des particules neutres dans l'instrument. L'utilisation de plusieurs dispositifs d'extraction (8 par exemple sur la *Figure IV-106*), permet d'alterner leurs fonctionnements pour une durée de vie de la source plus longue.

La *Figure IV-109* montre la vue de NIMEIS dans sa version finale où celui-ci est couplé à la source d'ionisation basée sur l'utilisation de nanotubes de carbone. L'ouverture conique limite l'entrée des particules neutres dans l'instrument.

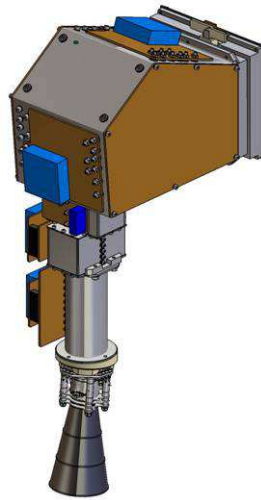


Figure IV-109 : Vue de NIMEIS couplé à la future source d'ionisation basée sur l'utilisation de nanotubes de carbone.

Résumé du Chapitre IV

Un modèle numérique complet de NIMEIS a été défini sous SIMION[®] à partir d'un modèle théorique de réflectron et d'optimisation génétique. NIMEIS permet de réaliser une distribution en énergie sur une bande passante en énergie de 5 à 15eV avec une résolution en énergie inférieure à 1eV entre 5 et 6eV et une analyse en masse avec une résolution de l'ordre de 30.

La souplesse de l'instrument permet d'apporter des modifications au modèle, comme le couplage de l'instrument avec la source d'ionisation STROFIO pour l'appel d'offre de la mission JUICE.

Le développement d'un prototype de l'instrument et d'un détecteur de positionnement et de mesure de temps de vol a permis de réaliser des premières mesures. La source d'ionisation de l'instrument PALOMA est utilisée pour obtenir des ions à l'entrée de l'instrument. Le détecteur utilise deux MCP pour amplifier l'impact sur le détecteur et un système de positionnement et de mesure d'impulsion rapide pour le temps de vol. Les premières mesures montrent le bon fonctionnement de l'instrument selon l'axe des énergies. La comparaison avec les résultats de simulations montre aussi la validité du modèle numérique.

Un concept de source d'ionisation basé sur l'utilisation de nanotubes de carbone (CNT) comme émetteurs d'électrons a été défini et réalisé. Une collaboration avec un laboratoire de l'Université Ajou en Corée du Sud et une R&T CNES a permis ce développement. L'ionisation se fait par impact électronique où les électrons sont obtenus par émission de champ à partir de nanotubes de carbone. La définition d'un premier montage d'extraction utilisant une matrice de colonnes de CNT où est placée une grille positionnée avec précision par rapport au CNT, permet, par effet de champ, d'extraire les électrons. Le courant obtenu sur le collecteur est trop faible par rapport au courant extrait. De plus, les potentiels mis en jeu sont trop élevés par rapport à l'énergie moyenne des électrons souhaitée. Un travail de simulation a permis de mettre en évidence le mode d'extraction des électrons qui se fait uniquement sur les bords des CNT, d'où l'impact d'une grande partie des électrons sur la grille d'extraction. La définition d'un nouveau montage d'extraction basé sur l'utilisation d'une surface plane de CNT et d'une grille posée à sa surface au même potentiel permet d'extraire les électrons au centre de la surface et non sur les bords. Les courants obtenus sur le collecteur ainsi que les potentiels d'extraction montrent que nous convergions vers une solution conforme à nos besoins.

V. Analyse des ions de basse énergie sur le satellite MPO de BEPI COLOMBO : le spectromètre PICAM

La seconde partie de ma thèse a consisté à définir le design de l'optique de l'instrument PICAM. Ce travail s'effectue avec le logiciel SIMION®, qui me permet de modéliser et d'optimiser l'instrument. PICAM est un spectromètre de masse d'ions capable d'analyser un hémisphère instantanément et de donner une image angulaire des particules ainsi que de leurs masses. PICAM fait partie de la mission Bepi-Colombo, qui est une mission d'étude de Mercure. Le Co-Principal Investigator (PI) de l'instrument est Lichtenegger, Herbert (anciennement Klaus Torkar) de l'IWF à Graz en Autriche.

Un rapport interne a été rédigé en anglais pour permettre aux différents laboratoires travaillant sur ce projet de comprendre la manière dont a été modélisé l'instrument ainsi que le détail des performances de l'instrument. Ce rapport est présenté ci-après.

Technical review of the modelling of PICAM

Joël Becker¹, Jean-Jacques Berthelier¹, François Leblanc¹ and K. Torkar²

¹ LATMOS/CNRS-IPSL, UPMC, 4, place Jussieu 75005 Paris

² IWF, Graz, Austria

1. Introduction

Mercury is the smallest and closest planet to the Sun and displays a number of original and intriguing properties. Due to its proximity to the Sun with a periastron at only 0.38 AU, the main feature of Mercury is the very high temperature of its dayside surface reaching about 700°K and the large temperature gradient with a night side surface temperature of only $\sim 100^\circ\text{K}$. The small gravity associated with the small size of the planet as well as the extreme heating on the dayside have resulted in the lack of a significant atmosphere with only extremely tenuous components that escape the soil mainly through thermal and photon desorption under solar illumination. A secondary source stems from the bombardment by solar wind ions that can reach the surface owing to the weakness of the planetary magnetic field. Neutral constituents outgassing from the surface with small velocities are rapidly ionized by the UV solar radiation, on the average 10 times more intense than at the Earth and populate, drift and are accelerated in the planet magnetosphere before being eventually lost to the solar wind. The near environment of Mercury is thus a magnetized exosphere where collisions are negligible. Despite its small size and high density, Mercury indeed maintains an intrinsic magnetic field which is certainly its most surprising feature. The interaction of this planetary magnetic field with the solar wind forms a small magnetosphere which was first observed by the US space probe Mariner 10 and revealed large variations. The detailed structure of the planetary magnetic field, the system of electrical currents in the planet environment, the magnetosphere dynamics, the sources, sinks and energization processes of the magnetospheric plasma are major enigma that space missions only can help to resolve.

Two space missions, MESSENGER (NASA) and Bepi-Colombo (ESA and JAXA) have been selected in the early 2000's to achieve the exploration of Mercury and its environment. The MESSENGER S/C orbits the planet since 2008 and has started to provide a number of new observations. The ESA/JAXA Bepi-Colombo mission to be launched in January 2016 is a more ambitious project based on the combination of the Mercury Planetary Observer (MPO), a low altitude spacecraft developed under ESA responsibility, and of the Mercury Magnetospheric Observer (MMO), a high altitude spacecraft on eccentric orbit developed under JAXA responsibility. One of the main objectives of these two S/C is to study the plasma processes that control the formation and dynamics of the magnetosphere, in particular to determine the sources, sinks and acceleration processes of ionized particles populating the near environment of the planet. Two consortia have been selected, SERENA on MPO and MPPE on MMO, each including a set of complementary and dedicated instruments to measure the ionized and neutral particles along their respective orbits.

PICAM (Planetary Ion CAMera) is part of the SERENA package on MPO and will measure the low energy ions that form close to the surface and ultimately drift through the planetary magnetosphere, as well as solar wind ions that penetrate through the high latitude cusp and cleft into the Hermean magnetosphere. PICAM evolves from the pioneering concept of the “Ion Camera” proposed by O. Vaisberg which first materialized in the DION instrument (Vaisberg et al., 2010) embarked on the ill-fated PHOBOS-GRUNT Russian planetary spacecraft.

Section 2 briefly summarizes the state of the art in 3D particle measurements on planetary probes and in section 3 we present the basic principle of operation of PICAM and describe the ion optics and the detector. The numerical modelling and the optimization of the ion optics are discussed in section 4. The main results of this work are displayed in section 5 to illustrate the instrument capabilities and, in the last section we summarize this work, and the possible future developments.

2. 3D charged particle measurements on-board 3 axis stabilized spacecraft

The MPO S/C is 3-axis stabilized to optimize the operation of cameras and optical remote sensing instruments that observe the surface. This is common on most planetary space probes and makes it difficult to measure the angular distribution of the charged and neutral particles, while measuring the 3D angular distribution of charged particles, ions and electrons, is of fundamental importance to decipher the plasma processes that control the plasma dynamics.

Earth’s spacecraft devoted to the study of plasmas in the ionosphere or magnetosphere are all spin stabilized. Most modern plasma instruments make use at their entrance of a rotationally symmetrical 2D electrostatic energy analyzer with an angle of deviation close to $\sim 90^\circ$. Such a configuration provides an instantaneous FOV of $[360^\circ \text{ in the “entrance plane” perpendicular to the symmetry axis}] \times [\sim 5^\circ \text{ to } 10^\circ \text{ perpendicular to it}]$. A 2D imaging detector at the exit of the ion optics thus measures the instantaneous angular distribution of incoming particles with their mean velocity direction close to the entrance plane. If the symmetry axis of the energy analyzer is perpendicular to the S/C spin axis, one obtains every half spin the complete 3D angular distribution of particles.

Various solutions were proposed to overcome the limitation raised by 3-axis stabilized planetary probes. J.J. Berthelier et al. (1998) designed the DYMIO magnetic ion mass spectrometer with 2 identical and oppositely directed heads, each with 16 fixed lines of sight having individual conical FOV of $\sim 8^\circ$ half angle, homogeneously distributed over a half space and sequentially operated. The complete instrument provided every 30s a coarse, discrete (32 directions) sampling of the ion angular distribution over the full space. The CAPS instrument embarked on the CASSINI orbiter (Young et al. 2004) used a mechanical rotation of the instrument around an axis located in the entrance plane which allowed exploring about $\pm 50^\circ$ perpendicular to the mean entrance plane over a period of 32 s.

Most recently launched planetary plasma instruments use an electrostatic deflector prior to the entrance of the analyzer to vary the line of sight perpendicular to the entrance plane and achieve a 3D FOV over an angular domain that can be optimized to take care of the constraints imposed by the geometry of the spacecraft and its appendices. (Solomon et al. 2001, Barabash et al. 2004).

All the above mentioned instruments require a sequence of measurements to scan the line of sight through the entire 3D FOV, while the instantaneous FOV is only 2D, limited to a plane or a cone. These results in a rather poor temporal resolution to get the full angular distribution at a single energy, from a few seconds to nearly 1 minute, depending on the specific solution used to explore the total FOV.

3. Overview of the Ion Optics and basic PICAM operation

For simplicity, a table is given with different abbreviations.

Abbreviation	correspondence
M1	Parabolic mirror at the entrance of the instrument
ECL	Converging Lens
ESA	Electrostatic analyzer
M2	Mirror to focalized particles on the detector
EEM	ECL+ESA+M2
$\Delta\alpha$	Full opening angle at ESA entrance
$\delta\alpha$	Angular aberration of $\Delta\alpha$
$\Delta\beta$	Field of view from the entrance of PICAM
$\delta\beta$	Angle resolution of $\Delta\beta$
FOV	Field Of View
TOF	Time Of Flight
DT	Drift Tube
GG	Grounded Grid
RG	Retarding Grid
DET	Detector
MCP	Micro Channel Plate
ΔR	Aberration on the detector due to the energy bandwidth

Tableau 9 : Overview of the abbreviations used in this section.

PICAM is a novel ion mass spectrometer with a near 2π (half-space) instantaneous field of view (FOV) and provides an instantaneous image of the ion angular velocity distribution at a single energy which can be swept from ~ 3 eV to ~ 3 keV. It has a mass resolving capability through time of flight (TOF) measurements over a mass range which can extend up to ~ 132 amu (Xenon). Its instantaneous images of the ion angular velocity distribution through its 2π FOV coupled with the ion mass determination by TOF measurements provides PICAM truly innovative capabilities in the field of satellite ion mass spectrometers.

3.1. Description of the ion optics.

The concept of PICAM can be understood from *Figure V-1*. The ion optics is rotationally symmetrical around the X axis and *Figure V-1* displays a cross section of the optics in the [X,Y] meridian plane. The aperture of the instrument is the entrance slit at the top and the detector is at the bottom of the Figure. Samples of ion trajectories are shown in green for ions entering over the $\sim 80^\circ$ actual range of elevation angles viewed by PICAM when mounted on the Mercury Planetary Orbiter (MPO). Velocity elevation angles are counted from 0° along (and opposite to) the X axis to 90° when perpendicular to X, thus parallel to Y.

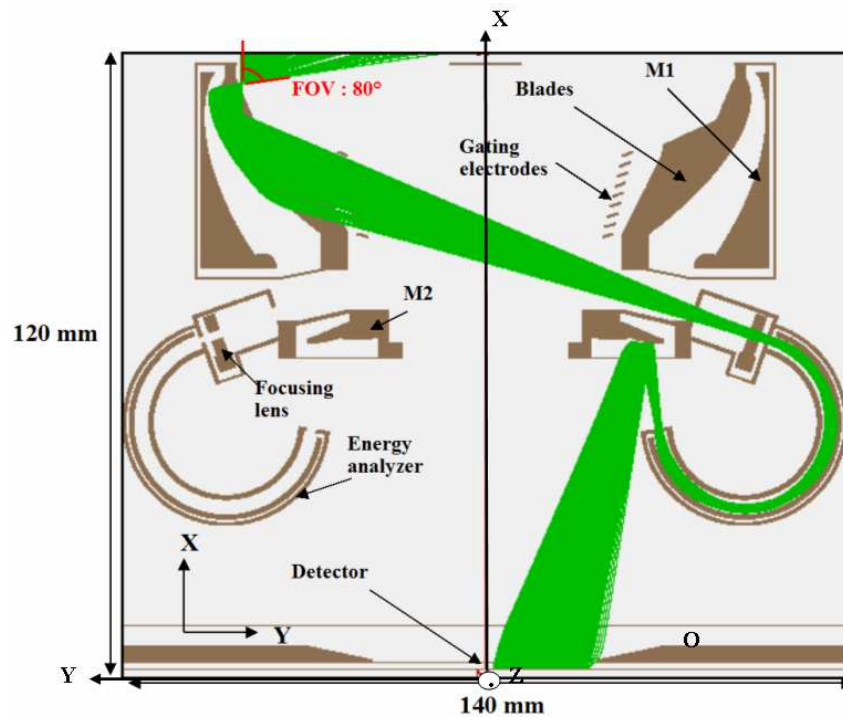


Figure V-1 : Schematic cross-section of the PICAM ion optics in a meridian plane. The origin and the X, Y, Z axis are indicated.

After entering the 0.5 mm wide Entrance Slit, ions are reflected by the electrostatic M1 mirror, located just behind the slit, which consists of 2 parts, an external electrode at the positive reflective potential VM1 and an internal part acting as a “grid” at 0V to produce the desired retarding electric field within the mirror space. The “grid part” consists of radial blades with a 0.35° thickness and spaced by 3° as shown in *Figure V-2*.

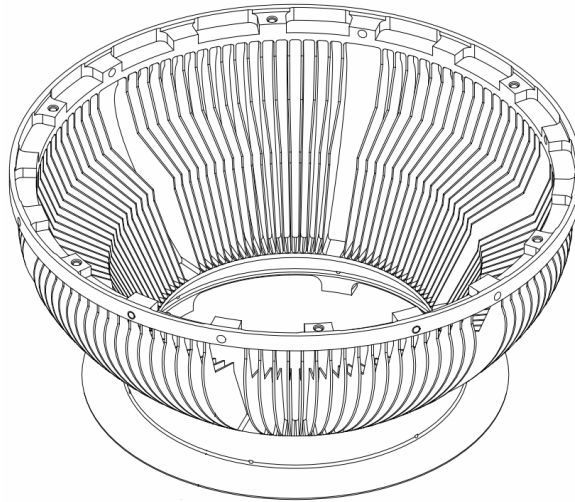


Figure V-2 : View of the mechanical plane of the blades.

The spacing of the blades and their shape in a radial plane control the range of azimuth angles of the ion velocity vectors that can reach the detector. This range must be limited to keep the desired performances of the instrument. The electrode and blades have geometries similar to concave elliptical mirrors in conventional optical systems and the M1 mirror plays a key role in the PICAM ion optics by reducing the 80° range of elevation angles at entrance to 10° that can be handled by the subsequent elements of the optics. In the DION instrument (Vaisberg et al., 2010), the M1 mirror had an azimuthally convex geometry and the reflecting electrode was the internal electrode, with a small azimuthal radius thus close to the X axis, while the blades were external to it. This geometry allows reducing the overall volume of the ion optics. However, electrostatic optics elements (lenses or mirrors) with electrodes having two opposite radii of curvature are known to produce diverging particle trajectories, a detrimental effect which is enhanced when the convex radii of curvature is small. This was the reason to modify the geometry of the M1 mirror in PICAM and to select the “concave/concave” geometry (concave both in azimuth and in elevation) shown in *Figure V-1* which helps to avoid diverging particle trajectories after reflection in the mirror space.

Exiting the blades, ions travel through the Gate Electrodes, a series of 9 ~ 0.7 mm thick conical electrodes that are used to gate the ion beam and measure the time of flight of ions between the gate and the detector from which the ion mass can be determined. To stop the ions, a U_{g+} gating voltage is applied to 5 gate electrodes while the opposite negative voltage U_{g-} is applied to the other 4 electrodes interspaced with the first 5 in a comb like structure (*Figure V-3*).

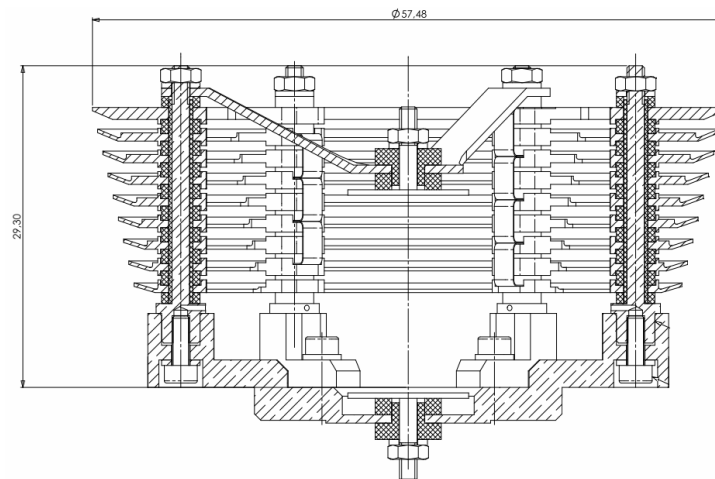


Figure V-3 : View of the mechanical gating electrodes to obtain the time of flight.

The electric field between 2 oppositely polarized adjacent electrodes deflects the ions and prevent them from entering the sub-sequent section of the ion optics.

Following the gate electrodes is the Converging Lens (CL) which consists of two parallel plates spaced by 2 mm, mounted within a grounded box and polarized at a positive potential VCL (Figure V-4).

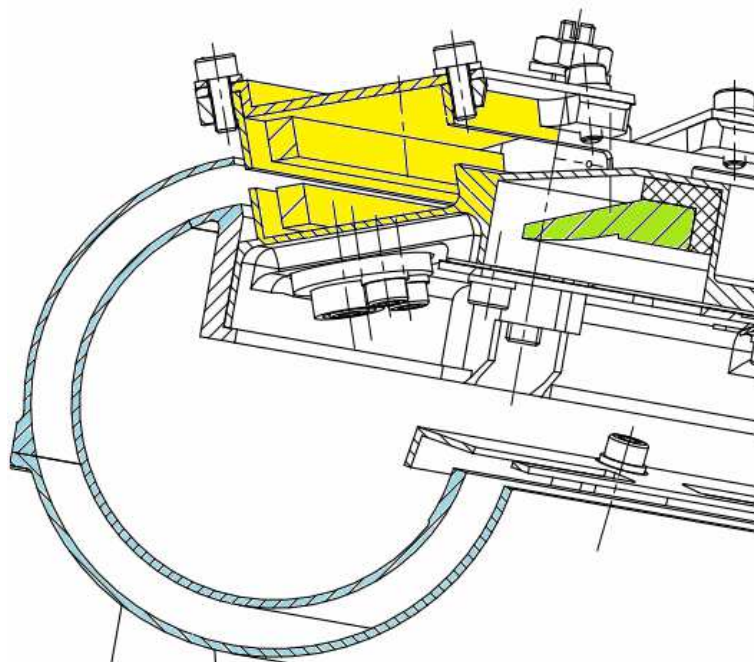


Figure V-4 : View of the mechanical drawing of the analyzer (in blue), the Converging Lens (in yellow) and the mirror M2 (in green).

This setting constitutes a simplified converging lens which is used to adjust the ion beam focus at entrance in the electrostatic analyzer and optimize the detector “image” of the ion angular distribution, as explained in section 4.3.2 of chapter V.

The Electrostatic Analyzer (ESA) (see *Figure V-4*) is a toroidal analyzer with its external electrode polarized at a positive VESA voltage and its internal electrode at 0V. The ESA configuration defined by its geometrical parameters (radius of the central ion trajectory, angle of deviation, and entrance and exit slits) allows determining the energy pass band and the mean direction and the angular dispersion of ions entering the secondary M2 mirror.

Ions exiting the ESA enter the secondary M2 mirror (see *Figure V-4*) composed of a rotationally symmetrical reflecting electrode, polarized at a positive voltage VM2 and faced by a planar entrance/exit grid at 0V. The electric field in the M2 space between the electrode and the grid reflects the ions towards the detector. The magnification of the ion “image” on the detector is controlled in part by the shape of the reflecting electrode.

At the exit of the M2 mirror, ions travel in a field free Drift Tube (DT) before crossing a Grounded Grid (GG) and hitting the Detector (DET) (see *Figure V-5*). The detector consists of 3 micro-channel plates (MCP) in a Z-stack configuration followed by a pixellized collector with 31 pixels shown in *Figure V-5* and covering the whole FOV of 360° azimuth and 80° elevation angles.

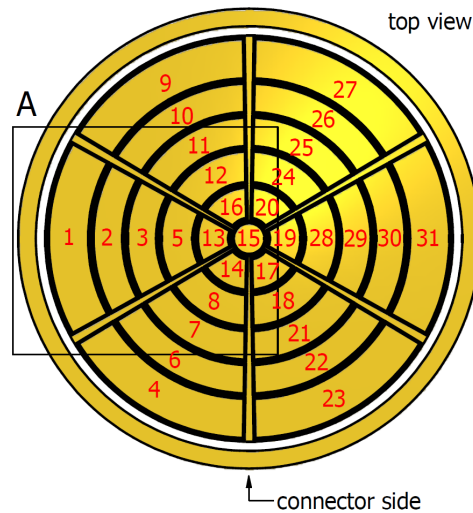


Figure V-5 : Schematic view of the pixels on the detector. The sector A corresponds to pixels used for the simulations and tests.

Apart from the central pixel, all other pixels correspond to the elementary FOV of 60° extent in azimuth and ~ 15° extent in elevation angles. Just before the front face of the first MCP is a repeller grid that aims at maximizing the detector efficiency. Indeed, some ions impacting the front face of the first MCP may generate secondary electrons that escape from the MCP without triggering any charge pulse and are thus missed by the detector. The repeller grid makes sure that all secondary electrons are reflected back into the MCP pores to trigger charge pulses at the exit of the 3rd MCP that are effectively detected, thus maximizing the detector efficiency which is enhanced by about 30% with respect to its value in absence of a repeller grid. Provision has also been made to integrate a Retarding Grid (RG) polarized at a positive retarding voltage VGR slightly less than the ion energy and located between the repeller grid and GG. The role of this retarding grid is to prevent the lowest energy ions within the energy passband to reach the detector. This reduces the energy aberration term in the TOF and improves the mass resolution of the instrument at the expense of the counting rate.

3.2. In-flight PICAM operation.

Since the imaging detector provides instantaneously the azimuth and elevation angles of ions entering the instrument through the location of the impacted pixel, only the ion energy has to be varied to obtain the complete ion distribution function. The mean energy of the detected ions and their energy pass band are controlled by the VM1 and VM2 potentials applied to the 2 mirrors, which both act as low energy filters, and by the potential VESA applied to the external electrode of the ESA which acts as truly pass band energy filter. The VCL potential is also positive and linearly dependant on the ion energy. If the retarding grid is used, the energy parameters are fine tuned through the positive retarding potential VGR. All these potentials are positive and linear functions of the selected energy, thus reducing the ion optics electronics to a single HV power supply which provides a positive voltage VPOS followed by several resistor bridges to obtain the other potentials applied to the various electrodes in the ion optics. In-flight, the operation of PICAM will thus be limited to varying the positive voltage VPOS.

This greatly reduces the electronics complexity, power and weight. Adjusting by modelling and calibration the ratio between VM1, VM2, VESA, VCL (and eventually VGR) and VPOS is needed to select the effective energy and energy pass band of the instrument and, to a lesser extent, the transfer function between the azimuth and elevation angle at the entrance and the impacted pixel on the detector.

The basic mass resolving capability can be achieved using a simple “Single Pulse Gating Mode” with ions being allowed to travel through the instrument during a short interval of time ΔT and the TOF spectrum subsequently measured till a time T corresponding to the anticipated time of flight of the highest mass ion species. In order to reach a good enough mass resolution ΔT has to be short and this mode of operation has a very low efficiency since the duty cycle $\Delta T/T$ is low, typically of the order of 1%. This is the reason why a “Hadamard Gating Mode” has been introduced in PICAM : the gates are opened and closed following a Hadamard temporal code which, theoretically, allows the duty cycles to be increased up to nearly 50%, thus largely increasing the total number of registered counts and the instrument sensitivity. The Hadamard code is a pseudo-random code, and the instrument sensitivity increases, but somewhat less than the increase of counts suggests, due to some coding noise which is introduced.

Basically, an instrument like PICAM could thus be operated along 3 different modes :

- a “Distribution Function Mode”, dedicated to the measurement of the global ion energy distribution function averaged over all ion species and using the full angular resolution offered by the instrument.
- a “Mass resolved Ion Distribution Function Mode” which would allow measuring independently the distribution function of major ion species with enough density to give statistically significant counting rates with the full angular resolution of the instrument.
- a “Mass Composition Mode” to search for the various ion species present in the Hermean exosphere without measuring the distribution functions.

For practical reasons, mainly due to telemetry as well as power limitations, the actual modes of operation of PICAM had to be more limited in terms of measured parameters and optimized to cope with the main science objectives and the measurement capabilities of other instruments onboard MPO and MMO.

4. Numerical modelling of the ion optics

The numerical model of the ion optics was built using the commercially available SIMION[®] S/W (Dahl, 2000) which is widely used to design electrostatic optics and determine their performances. SIMION[®] is a software package widely used to solve the Laplace equation and calculate the potential map in electrostatic optics given the geometrical configuration of the electrodes and the applied voltages. From this potential map the electric field and the trajectories of charged particles can be computed from their initial position and velocity. SIMION[®] uses a finite difference method to solve the Laplace equation in 2D and 3D arrays of up to ~ 200 million points (2GB) with the last version of the software. The new version limits the number of points by the RAM of the computer, see section 4.5 of chapter V, with optimizations for systems with symmetry and mirroring and an optimized linear-time solving. The main limitation of SIMION[®] stems from the computation grid which is not adaptative and is thus constrained by a mesh size constant over the whole simulation box and identical along the 3 coordinates. There is a considerable difference in memory size between 2D and 3D models since the number of points in a 3D model is larger than the number in a 2D model by a factor $\sim L/d$ where L is the typical dimension of the simulation box and d is the mesh size.

Since the mesh is non-adaptative, its size must fulfil the constraints imposed by the specific geometry of the ion optics which asks for a fine mesh at some specific location such as :

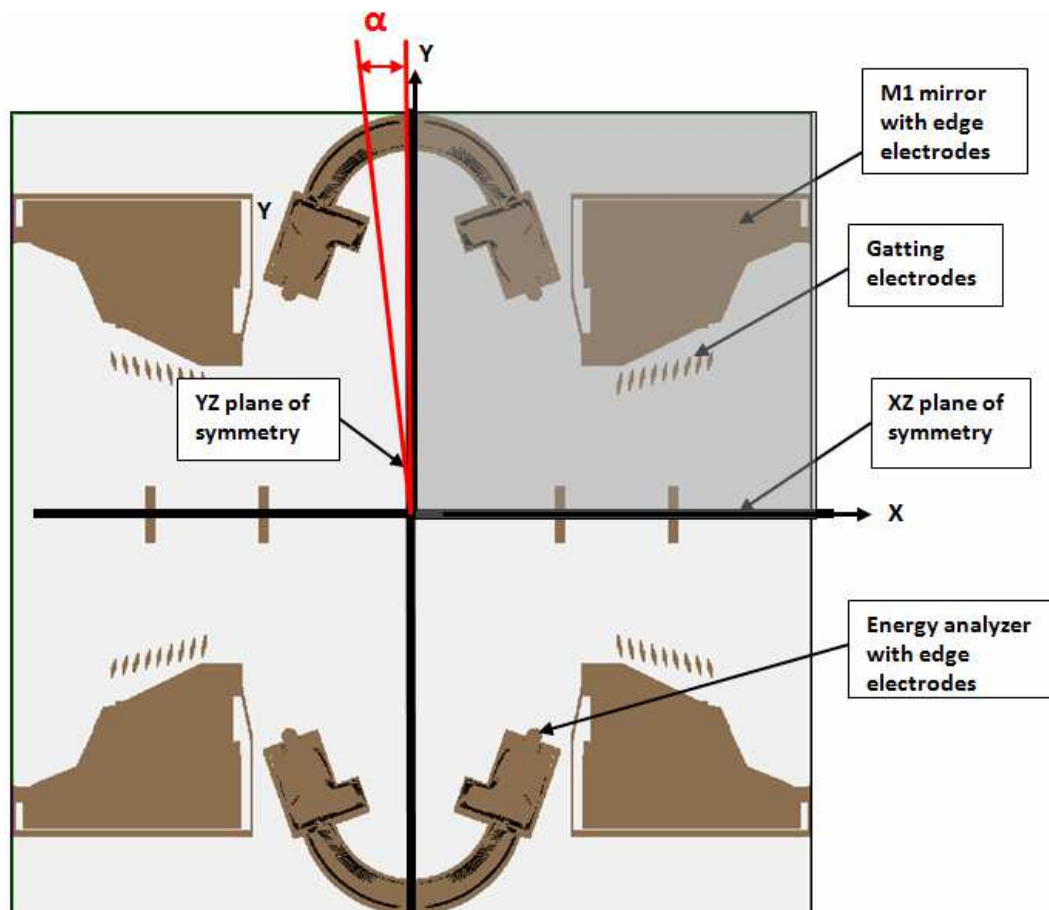
- close to the entrance slit and gate electrodes and at the interface between the Converging Lens and the ESA where the electrodes are at small distances from each other leaving only a reduced free space where the potential has to be modelled,
- in the M2 mirror with large potential gradients,
- close to the surfaces of electrodes, in particular the M1 and M2 reflecting electrodes, where the effects of discretization on particle trajectories need to be minimized.

A series of tests on various sections of the ion optics showed that a 0.06 mm mesh size provides satisfactory results and this value was adopted throughout our study.

As shown in *Figure V-1*, the section of the ion optics extending from the gate electrodes to the detector is rotationnally symmetrical around the X axis : it can be modelled in 2D with a 0.06 mm mesh size without exceeding the maximum memory allocated by SIMION[®]. As a remark, it may be worth pointing that the 2D model ignores the existence of mounting posts located at 60° from each other in some parts of the ion optics, in particular in the gate electrode section, in the vicinity of which the actual electric field will not be correctly represented in the 2D model. This will entail significant inaccuracies on the ion trajectories that come close to these posts but such trajectories only amount to a few % of those reaching the detector.

On the contrary, the blades make the M1 mirror a true 3D element which must be modelled as such. Since a 3D computation box encompassing the complete ion optics with a mesh size of 0.06 mm evidently exceeds the SIMION[®] memory capability, the ion optics has thus to be divided into 2 parts, each of them modelled independently but with a common interface. The first model [A], in 3D, must encompass at least the M1 mirror, the gate electrodes and the entrance in the converging lens since the 3D structure of the electric field extends from the blades till about this location. The second model [B], in 2D, would encompass the rest of the optics to the detector.

The first question to be solved is having an interface between the models [A] and [B] with identical and extremely accurate potential maps in both the 3D and 2D models. The mid plane of the ESA parallel to the YZ plane shown in *Figure V-6.a* (as a matter of fact, only the area of this plane within the gap between the 2 ESA electrodes) offers a suitable solution to this question since the entrance and exit faces of the ESA are sufficiently far from it to ensure that the potential structure is actually 2D and stays uniform in radial planes inclined at large enough α angles on either side of this plane (*Figure V-6.a*). To build the 3D model [A], we took advantage of an interesting capability of SIMION[®] that relies on symmetry properties, by modelling a “virtual” ion optics represented in *Figure V-6.a* which has 2 planes of symmetry respectively parallel to the [X,Z] and [Y,Z] planes and allows SIMION[®] to compute a perfect potential map close to and on the interface. On *Figure V-6.a*, the shaded area correspond to the simulated part, the others are symmetries obtained by the properties of SIMION[®]. This is far better than using the potential map computed in the 2D model [B] and disposing a large number of conveniently polarized electrodes on the interface plane to impose high resolution and accurate boundary conditions for the 3D model.



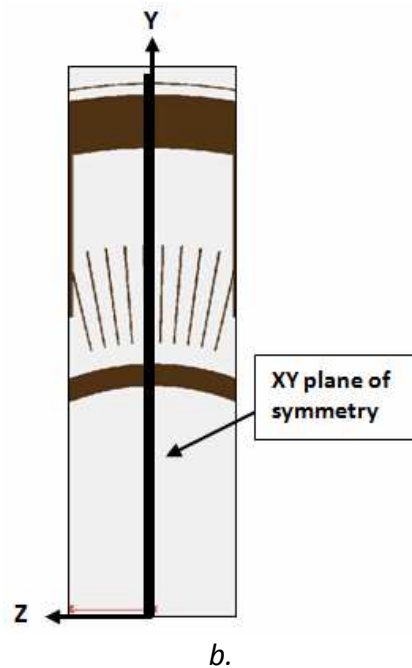
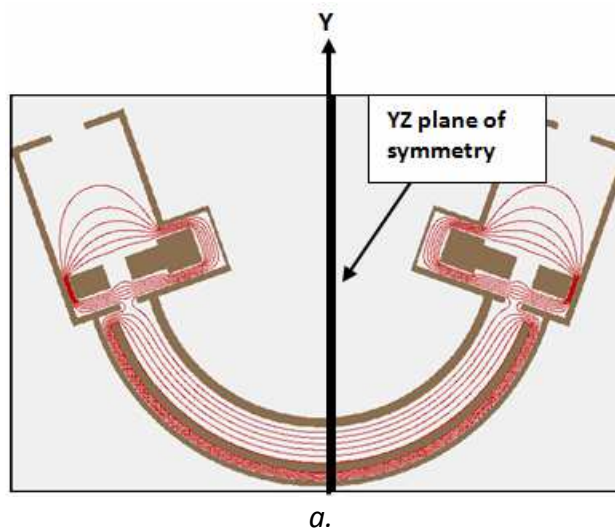


Figure V-6 : a. View of the 3D model in XY plane. We can see the two symmetries. The first is to limit the box size with the entry of the analyzer (XZ plane symmetry). The second is to have a good limit condition to get on the 2D model. b. View of the 3D model in XZ plane. The XY plane symmetry is to double the size along Z axis and limit the edge effects.

The second question stems from the maximum memory size allocated by SIMION[®]. This forced us to restrict the simulation box to 18 mm along the Z axis as shown in Figure V-6.b, again taking advantage of the symmetry with respect to the [X,Y] plane. When doing so, it is necessary to impose, by means of edge electrodes with convenient shapes and potentials, proper boundary conditions on the edges of the simulation box parallel to the [X,Y] plane. Since these boundary conditions are not known because they can only be deduced from the results of the model, we used an iterative method.



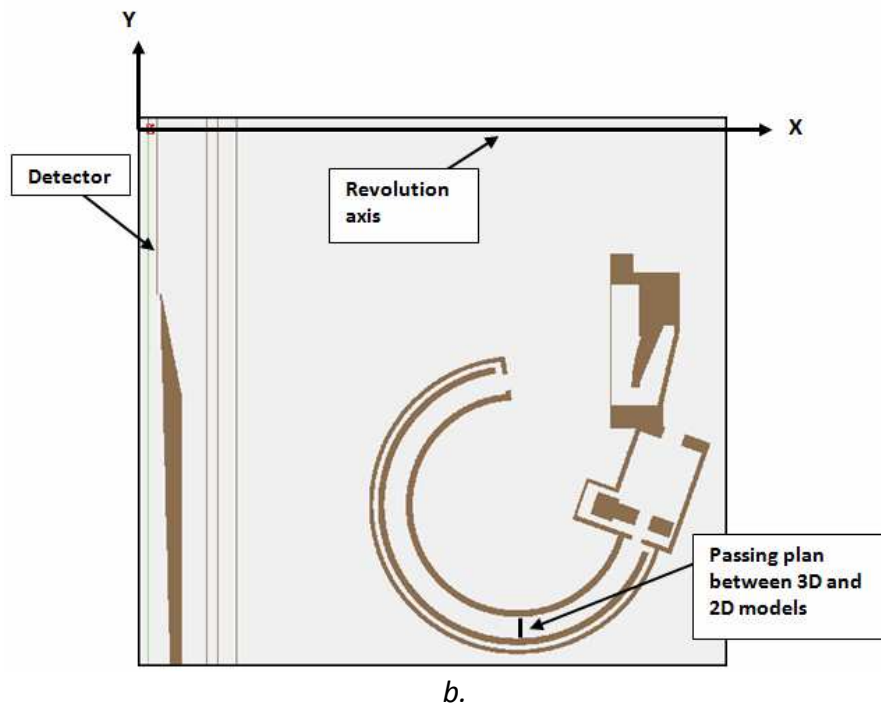


Figure V-7 : a. View of the 3D model in XY plane : symmetric energy analyzer to keep the parameters of the particle to remove on the 2D model. b. View of the 2D model : total energy analyzer to have good potentials at the passing plan, M2 mirror and the detector. A cylindrical symmetry along X axis is introduced to close the model.

The 3D model, composed by the M1 mirror, the lens and the half analyzer, is defined on 18 mm along the axis Z (Figure V-6.b). We cannot make the revolution of optics (mesh size). In this case, we need to put electrodes on the edges of our simulation box along the Z axis to be in the conditions of revolution. We put electrodes on the mirror M1, the focusing lens and the energy analyzer.

4.1. Optimization of the ion optics, principles

To simulate the instrument input, we define an entrance slit, a polar and azimuth opening and the covered area between two blades (Figure V-8). These input parameters are sufficient to take into account all the possibilities because the instrument is axi symmetric. It is then possible to choose a nominal energy or energy bandwidth. The particles injection at the entrance is as follows :

- o slit of 0.5mm in XY plane with 3 points by steps 0.25mm.
- o field of view of 80° in XY plane by steps 2°
- o slit between two blades in YZ plane, 9 points by steps 0.3mm
- o field of view of 30° in YZ plane (azimuth)

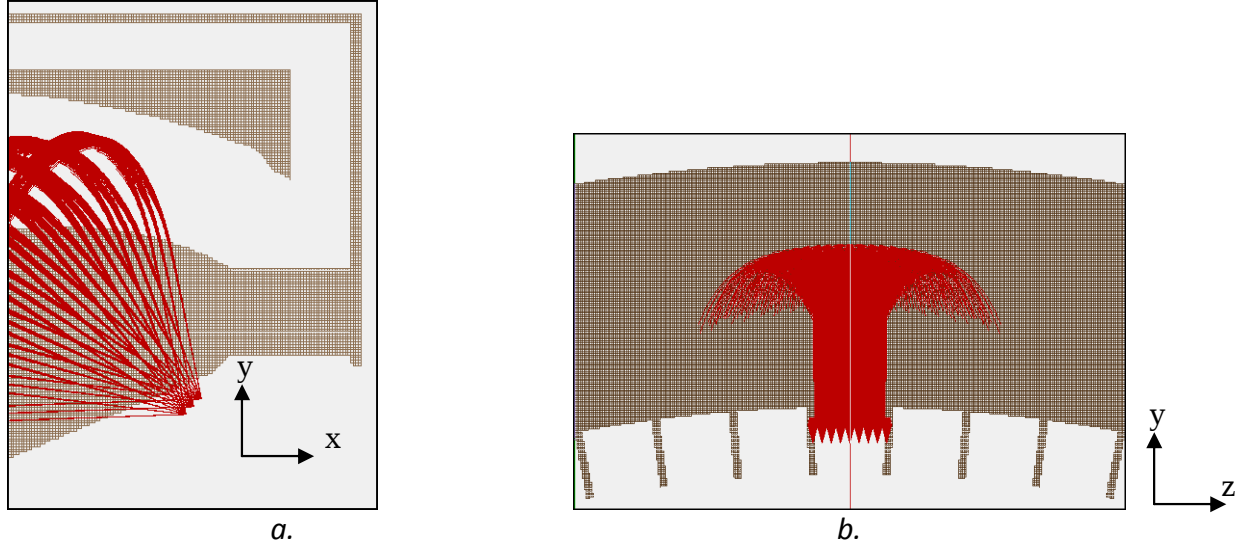


Figure V-8 : a. View at the entrance in XY plane. FOV of 80° with three points to define the slit of 0.5mm. b. View at the entrance in YZ plane. FOV of 30° with 9 points to define the slit between two blades.

The 30° azimuthal opening results in divergence of the beam at the output of mirror M1. This divergence is so large, that the particles will be stopped by the edges of our simulation box. If we look at the image on the detector obtained by performing the coupling between the 2D and 3D model by taking the coordinates and energies of particles in the half of the analyzer, the image will not be exact because particles could cross the edges of the box. These particles are therefore reinjected in the simulation.

The optimization of the optics is initially done for each element independently. Energy analyzer (ESA), mirror M2, focusing lens (CL) and mirror M1 are optimized one by one as it will be explained in the following.

4.2. Mirror M1, blades and gating electrodes

4.2.1. Mirror M1

A zoom of the mirror in the simulation box is shown in *Figure V-9*. Dimensions are 40 mm along X, 15 mm along Y, 18 mm along Z with a mesh size of 0.06 mm. Due to symmetry along Z the computation can be limited to half along Z :

- the angular thickness of a blade is 0.35° corresponding to an average thickness of 0.25 mm, (~ 0.3 mm at their larger ~ 50 mm radius and ~ 0.2 mm at their smaller 33.5 mm radius).
- the angular distance between blades is 3°
- the width of a blade is variable along the radial direction (Y axis). The form of the blade was optimized to cut the azimuthal beam in order to obtain a better resolution on the detector (*Figure V-9.a*).
- we place multiple electrodes on the edges to suppress any edge effects (*Figure V-9.b*)

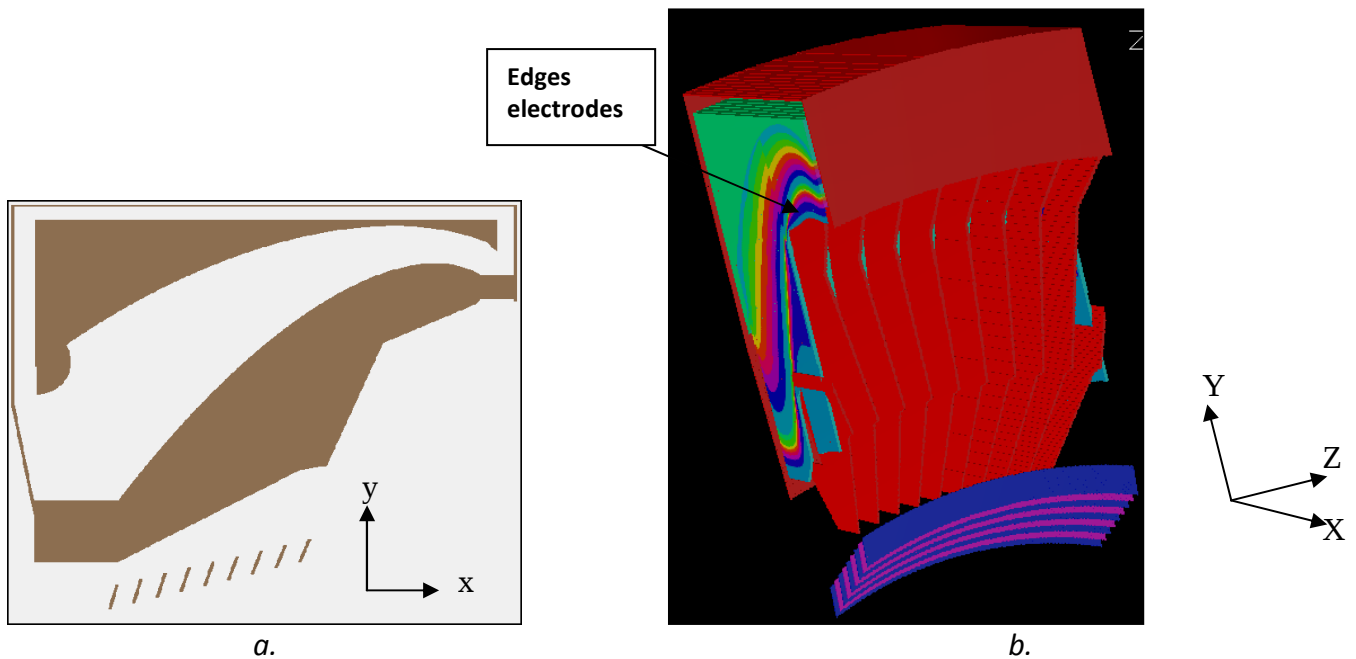


Figure V-9 : a. View of M1 in XY plane. We can see the particular geometry of the blade. b. Electrodes for proper boundary conditions are shown in colour.

Owing to the very sensitive behaviour of ion trajectories in M1, the accuracy of the computed potential, hence the accuracy and realism of ion trajectories, is a concern. There are 2 main questions :

- (i) the mesh size, we have taken the minimum mesh size 0.06 mm compatible with the SIMION[®] 32 bits addressing capability (last version of SIMION[®] software).
- (ii) end effects arising from imperfect boundary conditions at the edge of the computation box due to the limited extension of the box along Z and the impossibility to model the full M1. In addition to the expected periodic azimuth variation with a period equal to the angular spacing between blades, the potentials display a large scale variation along Z when no boundary conditions are imposed between the surface of the blades and the electrodes in the plane of the last blade (the so called "end effect"). To reduce this effect, proper boundary conditions have to be imposed in the plane of the box at the edge. This is achieved by adding a set of electrodes as shown in Figure V-9.a. We limit ourselves to take 17 electrodes to cope with computation speed and memory constraints.

The plane where we define the edge electrodes is not in the plane of rotation of M1 because our simulation box is rectangular (Figure V-10).

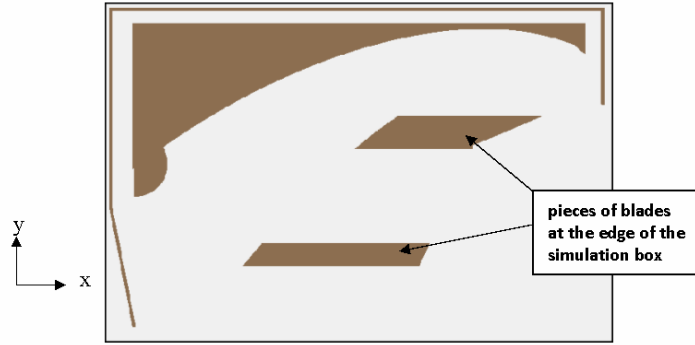


Figure V-10 : View of M1 at the edge of the box. With the rotation of the mirror and the blades, the section of the blade is not complete, we have two morsels of blades.

The potential of each electrode is calculated as follows. Shown in *Figure V-11.a* is a view of the [XY] plane at the edge of the box, featuring a sample of 150 sections by planes $X = X_i$ perpendicular to X. For the potential variation in this plane, we make a rotation of the plane from the edge of the box in the middle of our model. In this case, we have a better approximation of the potential we should expect. We make iterations by placing electrodes on the edge of the box from the potential variation in the middle plane of the model and we consider this variation for the next model (*Figure V-11.b*). We continue until the potential is not varying.

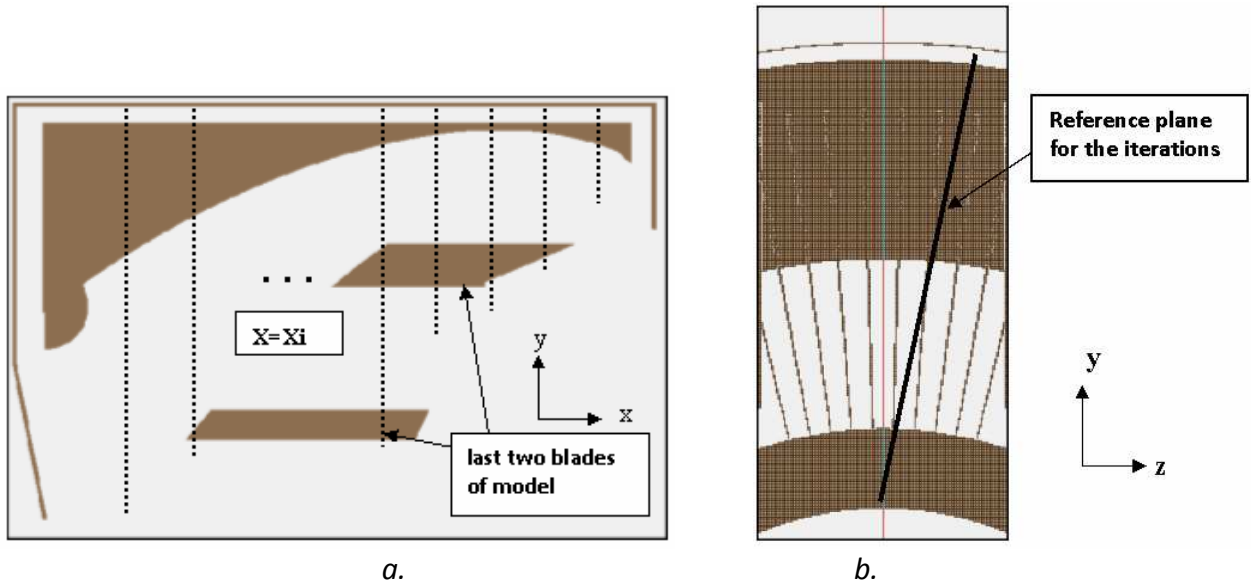


Figure V-11 : a. View of the mirror M1 in the XY plane at the edge of the box. Representation of boundary electrodes determination. b. View of M1 in YZ plane. In dark is the plane which we use to define the edge electrodes.

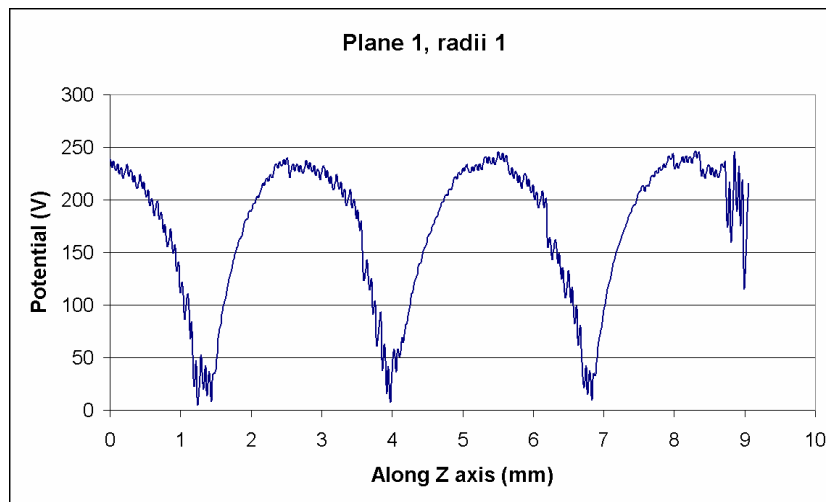
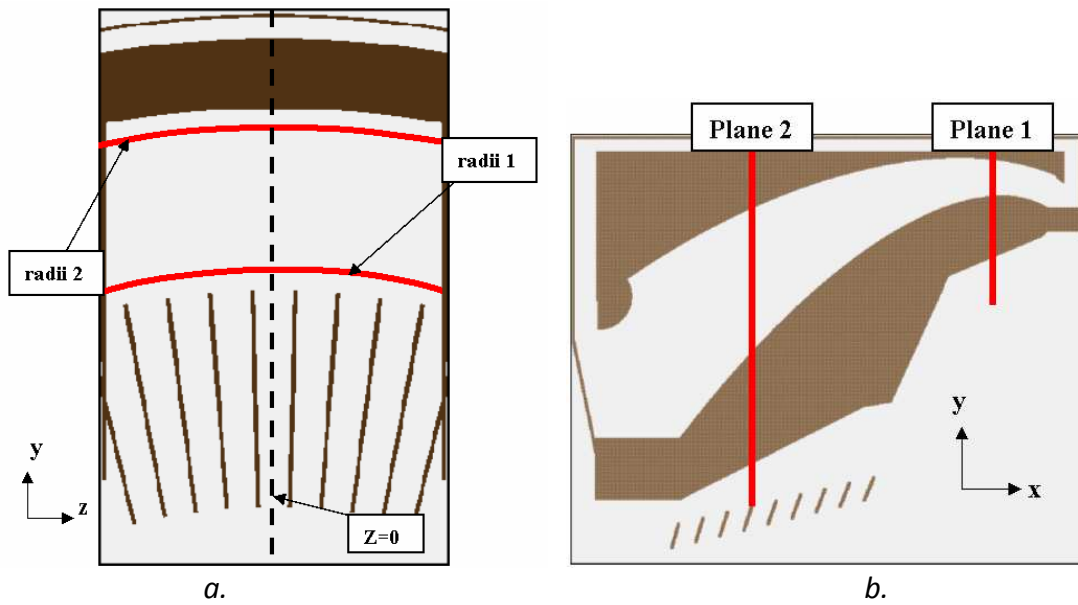
Using the potential calculated in the plane which represents the edge of the simulation box in 3D, 17 Y_j coordinates are determined in each section plane $X=X_i$ so that the potential V_j at the position $[X_i, Y_j]$ varies from 1 to 900 Volts by steps of 10 Volts (1V to 100V) and by steps of 100V (100V to 900V) for a potential of 1080 volts on the M1 electrode.

These curves define the boundaries of the 17 electrodes and the potentials imposed to these electrodes are equal to 3.5, 10, 20, 30, 40, 50, 67.5, 90, 150, 250,...950 volts.

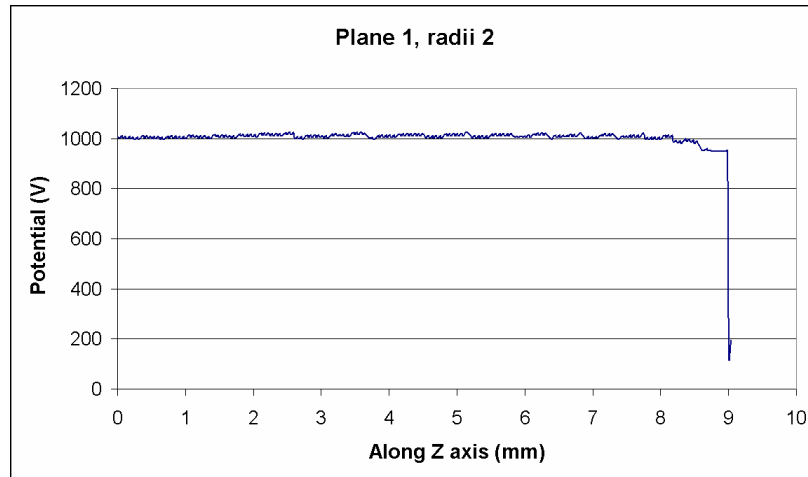
Figure V-12.a and .b illustrate the variation of potential along circles such as those depicted in 2 planes perpendicular to X

P1 : X= 113.116 mm for 2 radii, R1=54.374 mm and R2=51.77 mm

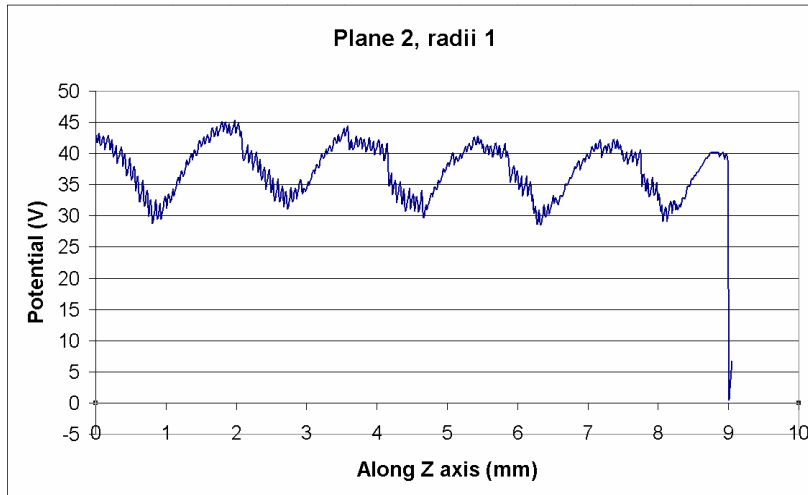
P2 : X= 89.06 mm for 2 radii, R1=35.05 mm and R2=43.4 mm as shown in Figure V-12.a and .b.



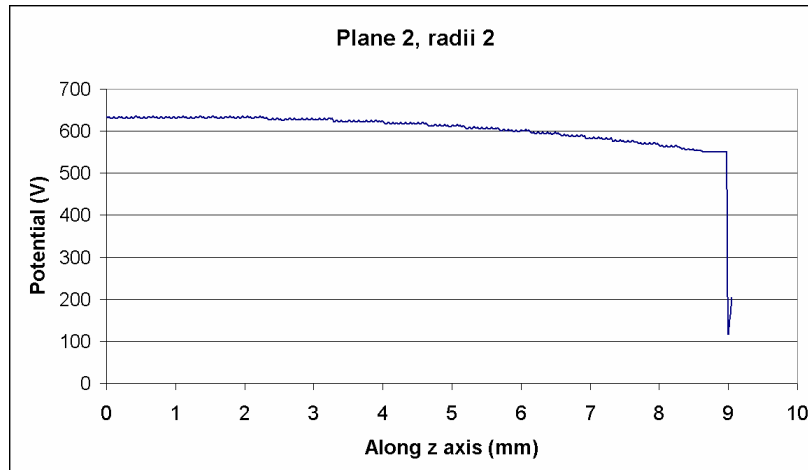
c.



d.



e.



f.

Figure V-12 : a. View along YZ axis of the mirror M1 displaying the two radii where the potential variation along the rotation of the mirror is shown. b. View along XY plane displaying the two planes where the potential variation is shown. c. Variation of the potential for the plane 1, radii 1. d. Variation of the potential for the plane 1, radii 2. e. Variation of the potential for the plane 2, radii 1. f. Variation of the potential for the plane 2, radii 2.

Figure V-12.c to .f displays one part of the definition of M1 along the Z axis. The point 0 corresponds to the middle of the mirror. At each point along the circle, the potential is computed by interpolation between the 4 nearest mesh points in the plane of the circle. Close to the M1 electrode there is no periodic (3°) variation of the potential and no end effect up to $\sim 12^\circ$ i.e. up to the 4th inter-blade interval. As expected, a strong 3° periodic modulation close to the blade surface is seen as well as insignificant end effects (large scale variations) for the upper plane (close to the entrance slit) till the 3rd inter-blade interval but a noticeable end effect in the lower plane (close to the exit of ions) already in the 2nd inter-blade interval. This has to be considered when studying the azimuth spreading of ions at the exit of M1 because ions travel through at least $\sim 6^\circ$ to 9° in azimuth. In conclusion, the potential computed in the 1st inter-blade interval can be considered as free from end effects and may be used to compute ion trajectories. One may note « high frequency » fluctuations on the potential curves that are certainly representative of the computational noise, of the order of $\sim 1\%$ of the local potential value. It is difficult to estimate the induced noise on the ion trajectories (thought to be minor).

To obtain a 3D geometry of the mirror M1 capable of focusing an elevation opening of 80° to 10° with a maximal slit entrance, an optimization of the mirror and blades was performed.

The goal of the optimization is to increase the geometrical factor while keeping the angular resolution compatible with the geometry of the detector pixels and mass resolution ~ 50 nominal and ~ 25 minimum.

In order to increase the geometrical factor, the angular spacing between M1 blades was taken large enough, 3° . Preliminary calculations have shown that azimuth spreading may be an issue with the current 2 mm width of the blades but, as indicated above, playing with the width of the blades and using them as diaphragms is thought to provide a solution to control the azimuth spreading.

The optimization is done without taking into account the TOF properties. These properties will be discussed in section 4.4 of chapter V.

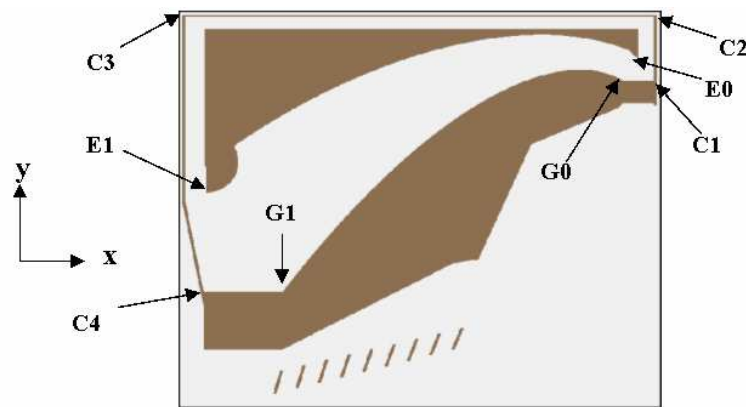


Figure V-13 : View of the M1 mirror. Description of the different parameters used to define the optimization.

The position of the 3D computation box is fixed along the Y axis since the radial positions of the reference points E0 and G0 of the electrode and the blade are fixed (Figure V-13). The X position of M1, thus the position of the computation box along X has to be varied during the optimization

process in order to match with the end section of the ion optics (see section 4.3 of chapter V), hence the adjustable parameter Δx .

The study of M1 was started using the geometry proposed by DION optics (Vaisberg et al. 2010) with a 70mm external radius, too large to be acceptable. The overall objective was to modify the geometry to reach an external radius ~ 55 mm while keeping similarly good performances.

The first goal of this study was to set up an optimization method and the corresponding computer code that allow to automatically modify the geometry of the M1 mirror (position with respect to the X axis of symmetry and shape of the electrode and grid) and optimize its performances.

The method can be briefly described as follows :

Modification of the M1 geometry :

- The X axis is the symmetry axis. The Y coordinates of the initial characteristic points E_0 (electrode) and G_0 (grid) are varied (decreased in the present case) by a “reasonable” amount (i.e. a few mm) ΔY from their initial values. Thus

$$Y(E_{0new}) = Y(E_{0init}) - \Delta Y, X(E_{0new}) = X(E_{0init})$$

$$Y(G_{0new}) = Y(G_{0init}) - \Delta Y, X(G_{0new}) = X(G_{0init})$$

- the shapes of the electrode and of the grid are modified independently through homothetical laws. For each of them 2 homothetical laws are applied with respect to the 2 axes going through M_{0new} (resp. G_{0new}), X' (parallel to X) and Y' (parallel to Y) such that the new coordinates $X_{new}(N)$ and $Y_{new}(N)$ of the N points that describe the electrode (resp. grid) curves in a radial plane of symmetry are obtained from the initial coordinates $X_{init}(n)$ and $Y_{init}(n)$ by the following equations :

$$X(E_{new(n)}) - X(E_{0new}) = \lambda_M * (X(E_{init(n)}) - X(E_{0init}))$$

$$Y(E_{new(n)}) - Y(E_{0new}) = \mu_M * (Y(E_{init(n)}) - Y(E_{0init}))$$

$$X(G_{new(n)}) - X(G_{0new}) = \lambda_G * (X(G_{init(n)}) - X(G_{0init}))$$

$$Y(G_{new(n)}) - Y(G_{0new}) = \mu_G * (Y(G_{init(n)}) - Y(G_{0init}))$$

- the potential and trajectories in the newly defined mirror $[M_{1new}]$ are computed using SIMION®. *Up to now, only trajectories in a radial plane and at a single (central) energy have been considered in the optimization process.*
- varying λ_M and μ_M and λ_G and μ_G independently (4 loops) and, for each geometry, varying the voltage V_M applied to the electrode, we looked for the values λ_{Mopt} , μ_{Mopt} , λ_{Gopt} and μ_{Gopt} that optimize the performances of the mirror (see section below) and a new “optimal” M1 mirror and voltage V_M are obtained. Typically λ_M , μ_M , λ_G and μ_G are varied from 0.9 to 1.1 by steps of ~ 0.02 , but the boundary values may be changed if the optimum solution is too close to a boundary.

We may also change the radius of the part of the electrode having a ball shape that is on the left side of the mirror M1. From this “optimal” mirror the same process can be repeated to reduce by ΔY the external diameter till the desired diameter is obtained. The changes in the geometry of the electrode and grid were made first using the LUA language embedded in SIMION®. However LUA constrains the total number of points to 80 to define the mirror M1 and the blades. Further in the study, the geometry of the electrode and of the grid has been defined, externally to SIMION®, through GEM files in a C code which is interfaced with SIMION®. The geometry of the electrode and grid can then be defined with the proper number of points. The number of points defining the mirror and the grid can change the geometry of these elements if the number of

points defining them is not large enough (staircase effect with SIMION®). Finally, we use files of ~ 300 points.

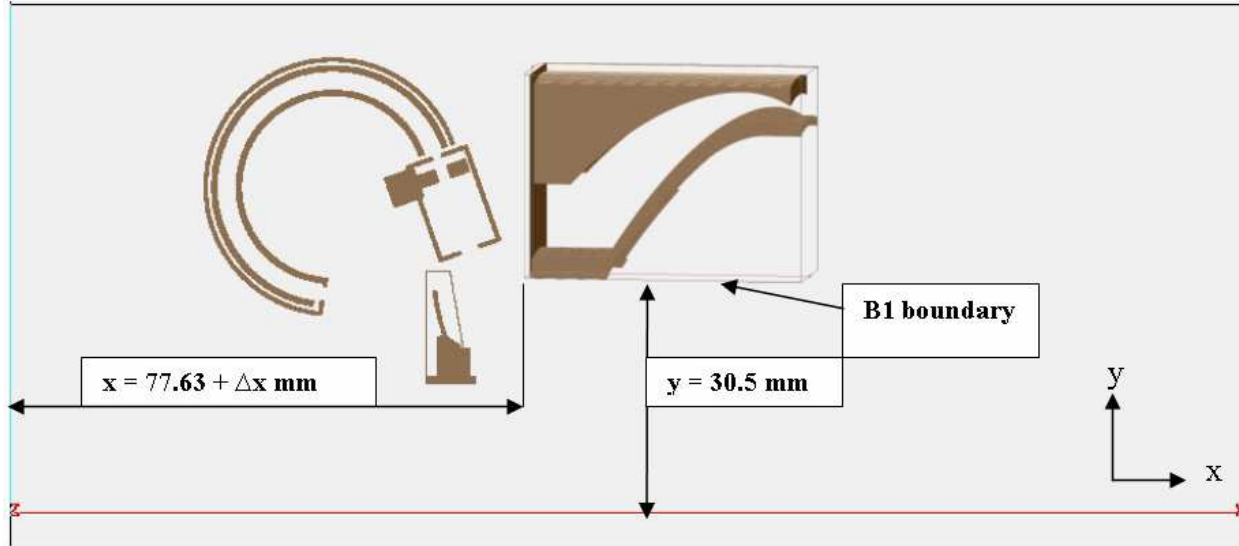


Figure V-14 : View of the optimization model of M1. Backward optimization to define the slit and forward optimization to increase the performances of the model.

To design the prototype we have considered that the end section of the ion optics [lens + analyzer + M2] has satisfying performances (large enough entrance slit, good imaging properties, good enough TOF properties in radial plane) and can be frozen : the 2D model is thus fixed, in particular the position of the centre of the entrance slit of the analyzer and the 70°5 inclination of the central ion trajectory. The optimization only concerns the M1 mirror and has been performed in two steps :

- backward optimization to get a first solution for the M1 mirror : ions are launched in a radial plane from the exit plane of the lens back towards M1 and stopped at the boundary of the M1 computation box at $Y = 30.5$ mm (Figure V-14). From their positions and velocities, their trajectories are then computed in the 3D model of the M1 mirror in order to find the best position for the entrance slit. The dimensions and shape of the M1 electrodes and blades are varied to get the best entrance slit.

- forward optimization to provide the final optimal solution : it defines the entrance slit and gets instrument performances to be compared with the ion beam tests (beam width along $X=5.34$ mm at $Y=0$). In this step, ions are launched from the entrance slit, travel through the 3D M1 model and are stopped at the B1 boundary (Figure V-14). From their positions and velocities their trajectories are computed in the 2D model of the end section of the ion optics till the detector where the total number of detected ions and their impact positions can be used to optimize the performances of the instrument. In either case, moving the M1 mirror along X can be achieved simply by adding a Δx to the X coordinates of the ion positions at B1.

The following paragraph contains the notions of backward and forward with greater precision.

Backward optimization :

Ions are launched from the exit of the lens in the symmetry plane at 9 points L_i spaced by 0.1 mm (total width of slit 0.8 mm) back towards M1. At each point 11 velocity angles are considered :

the central one is inclined at $70^\circ 5'$, the other are within $\pm 2.5^\circ$ from the central one by steps of 0.5° . At this stage a 3D model of M1 is used.

For each launch position L_i one gets from the 11 angle trajectories a “focal spot” centred at F_i and with a width w_i in a plane (P_i) at the entrance of M1 inclined at 45° with respect to X. The optimal position of this “focal spot”, hence the position of the corresponding focal plane, is determined by minimizing the width w_i of the spot. Each launch position has thus its own focal plane (P_i). For continuity reasons, all ions launched from the slit at the lens exit between L1 and L9 will fall between the 2 extreme positions F_{min} and F_{max} of the 9 points $F_1, F_2 \dots F_9$. F_{min} - F_{max} defines the extent of the entrance slit of M1 centred on F_s , the mean position of $F_1, F_2 \dots F_9$. The plane of the entrance slit is the plane (P_s) inclined at 45° with respect to X that contains F_s . Since $F_1, F_2 \dots F_9$ are not all in the same plane, the actual width W_s of the entrance slit in the plane (P_s) is smaller than F_{min} - F_{max} but proportional to it (and actually very close to it). The best M1 geometry is obtained by maximizing F_{min} - F_{max} . The variable M1 parameters are :

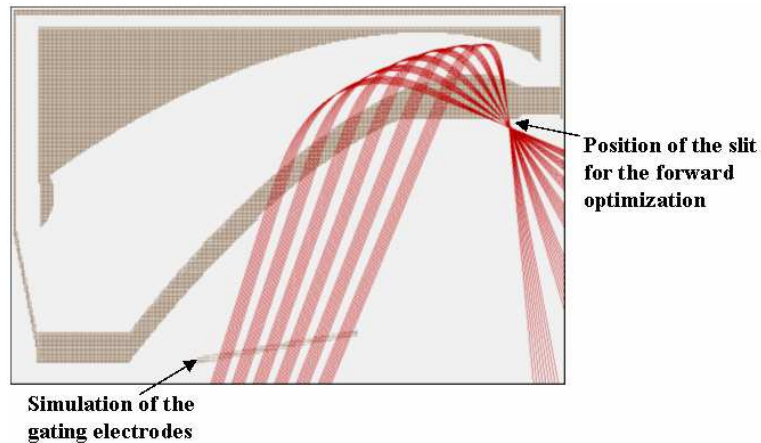
- its position along X (i.e. the X coordinate of the M1 reference points E0 and G0) which is defined by the X position of the computation box controlled by the Δx parameter shown in *Figure V-14*.
- the potential $VM1$ on the electrode
- the geometrical characteristics of the electrode and blade surface that are varied according to the homothetical transform.

Forward optimization :

In a final step the 3D M1 mirror is optimized using the forward optimization. Ions are launched in the mid plane to the [YZ] plane with $Z=0$. The entrance slit is in a plane inclined at 45° with respect to X centred on slit average (obtained from the backward optimization) and the total width of the entrance slit W_s has been successively taken equal to 0.3 mm and 0.5 mm in the two runs that were performed. The entrance slit is defined by 17 points and from each of these points ions are launched with 80 angles from 0° to 80° with 1° steps. The energy is the nominal energy, 1 keV.

The positions of the ions as they impact the detector are binned in pixels with 2mm radial extent. The histogram of ion number as a function of pixel position for the various angular ranges at entrance $[0^\circ-10^\circ]$, $[10^\circ-20^\circ]$ etc...is computed to determine the effective transparency (percentage of ions that reach the detector) and the angular resolution of the ion optics.

The following *Figure V-15a* and *.b* shows the two steps of optimizations mirror M1.



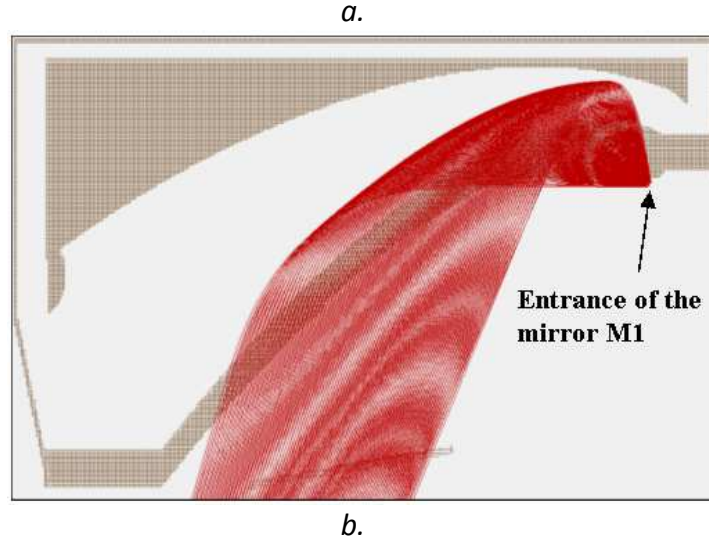


Figure V-15 : a. View of the simulation box to optimize the mirror M1 in backward. 9 points to define a slit of 0.8mm, 6 angles centred at 70.5° with $\pm 2.5^\circ$ by steps 1° . There is the simulation of the gating electrodes and the position of the slit at the entrance of the mirror M1. b. View of the simulation box in the forward optimization. We determine the position of the analyzer entrance.

This optimization is also backward then forward. We simulate the gating electrodes by placing a grid. Gating electrodes produce an effect of bubble potential that will stop the output field of the mirror M1. At this point in the optimization, we do not yet know the precise location, number, thickness and inclination of these electrodes. We therefore choose to simulate a grid that will effectively block the field lines of the output mirror M1. The optimization is done backward from a single position and one position for the mirror M1 with one potential which is 1kV for ions of 1keV (*Figure V-15.a*). From this result, we define as before a centre slit position at the entrance of the mirror that serves as a setting for launches in the forward optimization (*Figure V-15.b*). The entrance slit is 0.3mm and 0.5mm with a 0.1mm step. We have an opening angle of 80° . We vary the mirror potential from 900V to 1200V with a step of 20V. We determine the size of the focal length at the entrance of the lens and we consider the case where the focal length is the smallest at the entrance of the lens.

Then we realize a launch of results in the imager where we determine the angular distribution on the detector with a resolution of 10° as in *Figure V-16*. The objectives of optimisation are to maximize the transparency of the mirror M1 and maintain an angular resolution $\sim 15^\circ$.

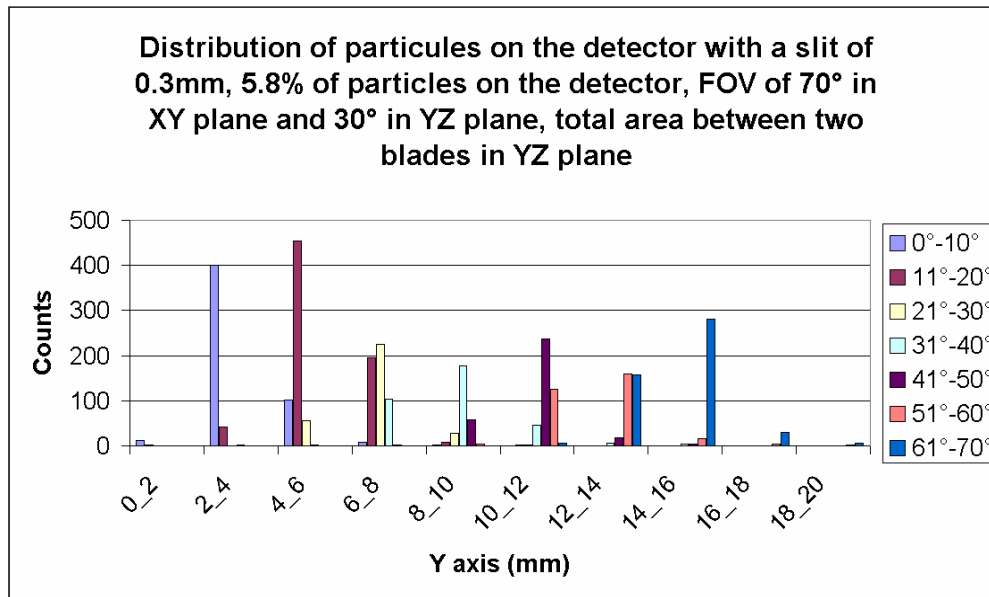


Figure V-16 : Histogram of the flight model results. 5.8% of particles on the detector. FOV of 70° in XY plane with a slit of 0.3mm. FOV of 30° in YZ plane using the total azimuthal area between two blades.

4.2.2. Blades

The blades are placed just after the mirror M1. The angular distance between each blade is 3° along the axis of rotation of the instrument (around X axis). The thickness of the angular blades is 0.35° along roughly the same axis of rotation. The thickness will vary depending on the distance from the axis of rotation (Y axis). In the XY plane, we optimize the width of the blades. This width will reduce the spot on the detector in azimuth. As shown in the Figure V-17, the width of the blade here is 5mm (width arbitrarily chosen).

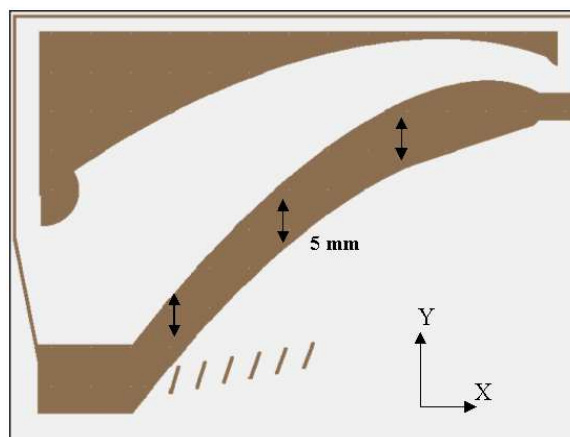


Figure V-17 : View of the mirror M1 with 5mm thickness blades.

Taking an opening of 30° in azimuth, the image on the detector is divergent in azimuth as shown in Figure V-18. The image has a size of 60 mm on the detector as particles are launched between two blades (an area of 2.3mm) around the PICAM axis.

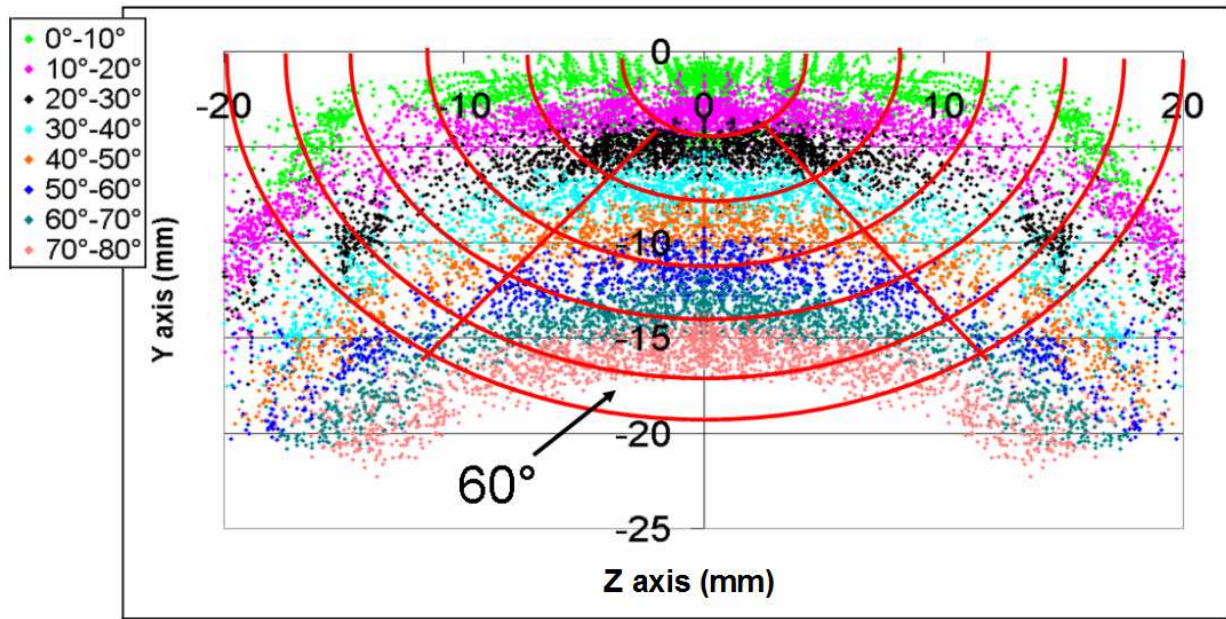
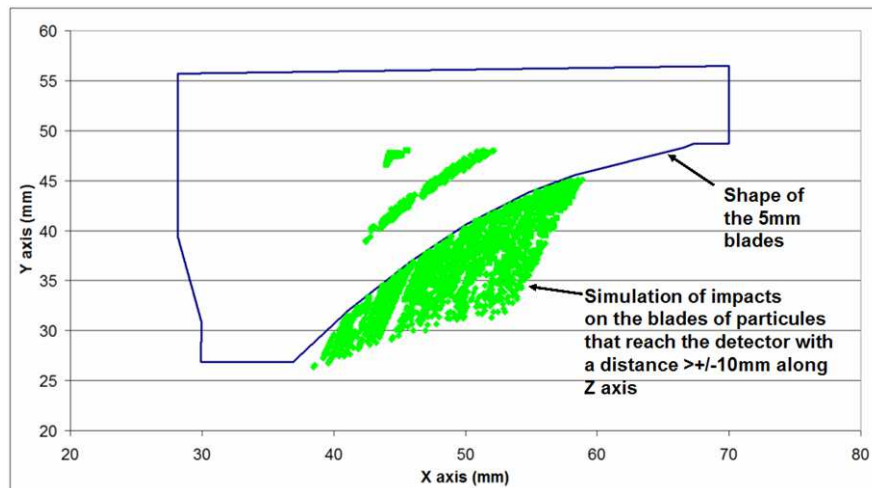
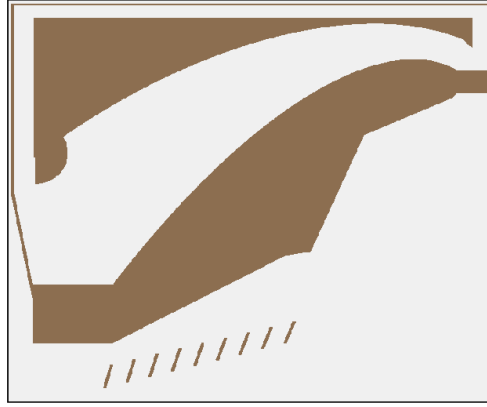


Figure V-18 : Impact distribution on the detector with the M1 and 5mm thick blades. Each colour represents a different 10° FOV in elevation at the entry of the mirror M1. Particles are injected along 80° in elevation, with an acceptance of 30° in azimuth. In red, is represented the detector with 31 pixels.

The image on the detector is much too wide along the Z axis. We must therefore reduce the dispersion of the impact along the Z axis (azimuthal direction). To avoid losing the entire flow, we decided to keep all particles which impact within $\pm 10\text{mm}$ of the central position. Other particles will be stopped by the blades at the exit of M1. This constraint allows us to define a new blade design.



a.



b.

Figure V-19 : a. Representation of the shape of the 5mm blades of the M1 mirror and the impacts simulation of particles where the value on the detector is $> \pm 10$ mm along the Z axis. b. By results, we define a new shape of the blades to cut particles to increase the azimuthal resolution.

Figure V-20 shows the resulting image on the detector with the new geometry of the blades. With these blades, we obtain a transparency of 2.25%. The transparency of the instrument changes from 5.8% to 2.25% after the change of the shape of blades. Half of the particles reach the detector with a large azimuthal dispersion.

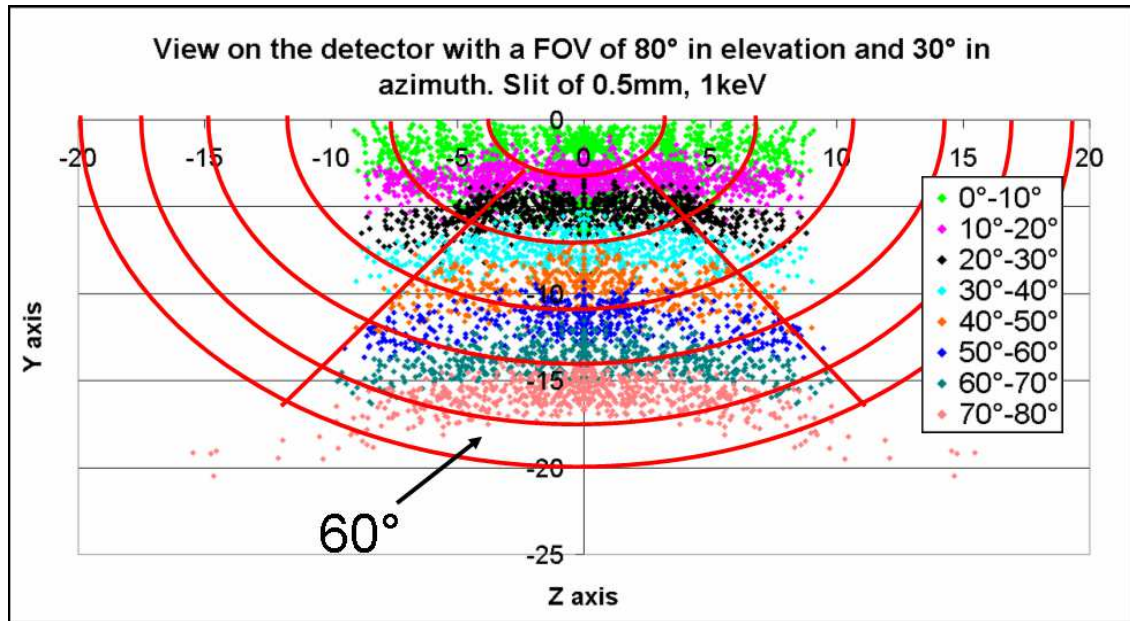


Figure V-20 : Impact distribution on the detector after optimization of M1 blades. Each colour represents a different 10° FOV in elevation at the entry of the mirror M1. Particles are injected along 80° in elevation, with an acceptance of 30° in azimuth. Red lines represent the detector with 31 pixels.

4.2.3. Gating electrodes

The first test to perform is to check if a gate can be placed along the beam in order to derive a similar time of flight for all angles. As shown in *Figure V-21*, the design of the gates can be done with an inclination of 10° and placed as close as possible to the first mirror.

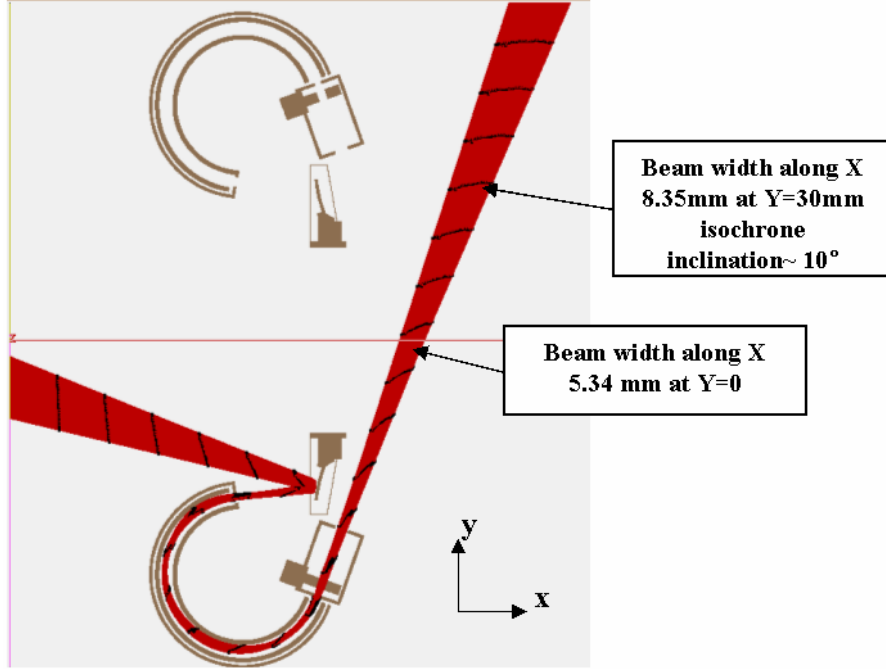


Figure V-21 : Representation of the particle time in dark and ion trajectories in red. Particles are launched from the detector up to the entrance slit. Black markers correspond to time of flight separated by 25ns.

The second step is a more detailed study with the gate electrodes included in the 3D model of the mirror M1.

The gate electrodes characteristics are the following :

- thickness of 0.2 mm.
- the electrodes are disposed every dx mm along X axis and their length is 2mm. Their edges facing the ion beam are disposed on a plane inclined at an angle β with respect to X.
- the lowest electrode (i.e. the electrode located the closest from the $X=0$ plane of the detector) is $dx/2$ mm below the lowest ion trajectory and parallel to it, with an inclination angle α_1 with respect to X. The highest electrode is parallel to the highest ion trajectory with an inclination angle α_2 with respect to X and must be at least $dx/2$ mm above the highest ion trajectory. Combined with the spacing dx along X between adjacent electrodes, this condition allows determining the total number N_g of gate electrodes.

The inclination angle α_i of electrode i varies linearly from α_1 for $i=1$ to α_2 for $i=N_g$. The *Figure V-22* shows the parameters that are used.

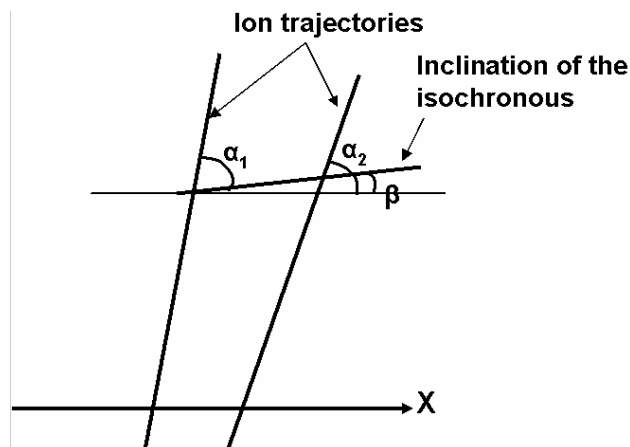


Figure V-22 : Drawing to explain the parameters to define the gating electrodes.

A total of N ions are launched from the entrance slit (0.5mm with a FOV 0° - 80° in elevation at 1keV with a width of $\pm 5\%$ in energy) up to the entry of the converging lens.

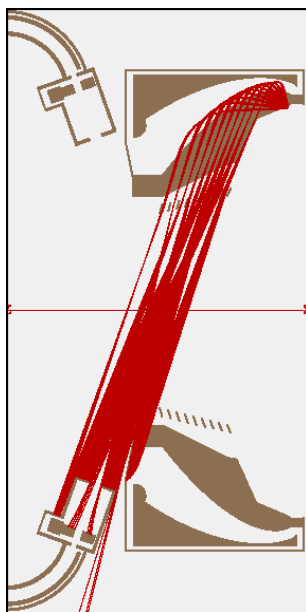
All electrode geometrical parameters can be varied to search for an optimal solution.

It is assumed that alternate potentials $+$ and $-V_g$ are applied to the electrodes to block the ions.

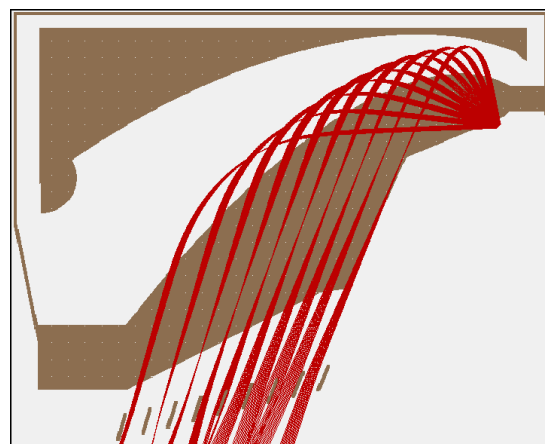
V_g is determined for each geometry of the electrodes so that no ion is admitted in the analyzer.

We have the following parameters (Figure V-23.a and .b) :

- 2mm height
- 0.2mm of thickness
- 9 electrodes
- $\pm 30V$ applied on the electrodes correspond to the just sufficient potential to cut the beam



a.



b.

Figure V-23 : a. View of the 3D model. Particles in red are launched in a radial plane between two blades, gating electrodes at $\pm 30V$ to impact all the beam at the converging lens. 150 particles

are launched, elevation 0° to 80° by steps 8° , through a slit of 0.5mm by steps 0.033mm , 15 points are used to define the slit. b. Zoom of the mirror M1 and of the gating electrodes

4.3. The imager part of PICAM

An initial modelling of the M1 mirror prior to its optimization has shown that exiting ion trajectories will be inclined with respect to the X axis at an average angle between about 65 and 75° , close to the value adopted for DION and, due to dimensional constraints, the average radius of curvature of the ESA must also be rather close to the DION value. The last part of the ion optics, ESA and M2 mirror, should therefore have an overall configuration similar to that of the DION instrument. A first study was done to check that “reasonable” changes in dimensions, position and orientation that could be made necessary by the M1 optimization would not modify the basic imaging properties of the ESA and M2 mirror.

Since the main role of the last part of the ion optics is to transform the angular distribution of ions in a symmetry plane at the entrance of the ESA into an image along a radius of the detector, this study was limited to 2D ion trajectories in a symmetry plane. A 0.05mm mesh size was adopted.

4.3.1. Electrostatic Analyzer

The ESA is a toroidal analyzer with a mean radius of curvature of 16.5 mm and a gap of 3 mm between the internal electrode ($R_i = 15\text{ mm}$) and the external electrode ($R_e = 18\text{ mm}$). In order to simplify the electronics the internal electrode is polarized at 0V and the external electrode at a positive potential which is proportional to the ion energy and thus to the polarization voltage of the M1 mirror. The two parameters that mainly control the ESA properties are the deflexion angle and the inclination of the entrance plane with respect to the X axis. As mentioned above the nominal average inclination angle at entry should be $\sim 70^\circ$ with respect to the axis of symmetry X and, from a preliminary study, the total deflexion angle of the ESA is known to be $\sim 241^\circ$. Shown in *Figure V-24* is a case with a 50° and 90° inclination angle at entry and a larger deflexion angle of 250° with still good focusing properties at exit. Several runs were made which have confirmed that varying the inclination angle of the ESA by $\sim \pm 10^\circ$ does not modify substantially the focusing properties at exit.

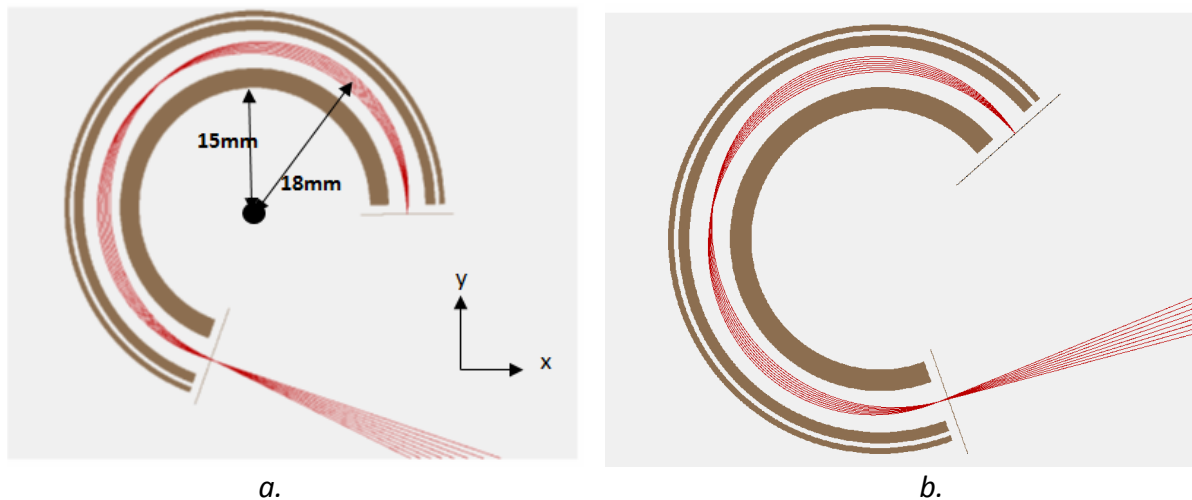


Figure V-24 : a. Inclination angle at entrance 90° b. Inclination angle at entrance 70° . Deflexion angle 250° , centre of electrodes at 50.5 mm from the X axis, voltage on the external electrode

4.3.2. Electrostatic Converging lens (ECL)

As will be shown below in 4.3.4, the main aberration of the [ESA + M2] sub-system of the ion optics is due to the energy bandwidth of the ions while this sub-system keeps its optical properties irrespective of the ion beam opening at entrance of the ESA. To get the best image on the detector, this opening should be maximized to reduce as far as possible the relative importance of the energy aberration. We thus aim at having a full opening angle $\Delta\alpha \sim \pm 5^\circ$ at the entrance of the ESA as allowed by the gap between the internal and external electrodes.

With the PICAM design, the M1 mirror is located at ~ 70 to 80 mm from the entrance of the ESA and the full angular opening of the ion beam at the entrance of the ESA is $\sim \pm 3^\circ$. To increase this angle to $\pm 5^\circ$ a converging electrostatic lens was placed in front of the ESA entrance plane. The second benefit of this lens is to provide a means for a fine adjustment of the focal point of the ion beam exiting from M1 which may help in optimizing the overall performances of the ion optics. To stay simple and save electronic resources, the ECL was designed with a single positive electrode within a grounded box. The potential of the electrode will be proportional to the ion energy, thus proportional to the M1 potential.

The ECL is shown schematically in Figure V-25. The optimization study to find the potential to be applied to the electrode was performed using the initial geometry of the ESA with an inclination entrance at 70.5° and a 244° deflexion angle. Again, if the geometry of the ESA is slightly modified to take into account the optimization of M1, the ECL performances will not be substantially modified. The numerical code used to model the ion optics easily allows to fine tune the geometrical configuration of the ECL to take into account the constraints imposed by the M1 mirror during the global optimization of the ion optics.

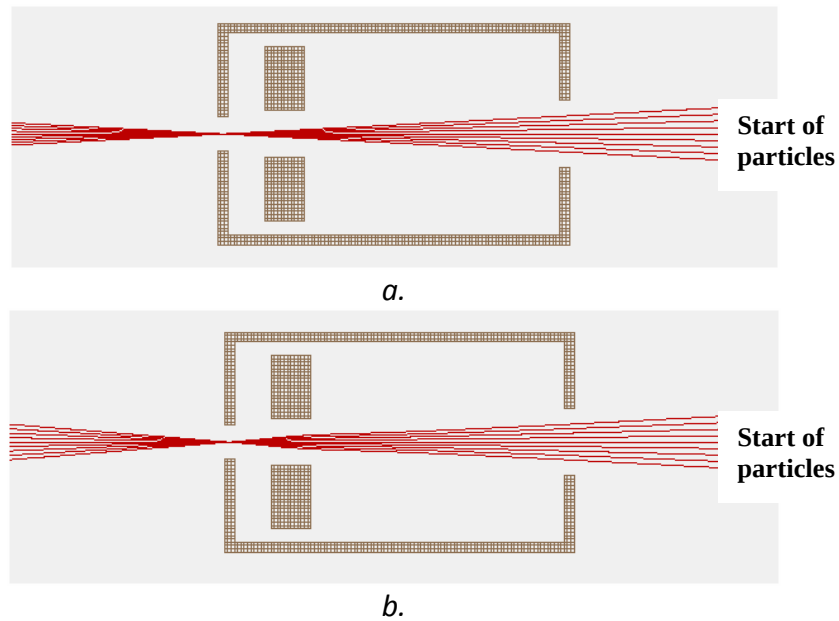


Figure V-25 : Schematic view of the ECL. The geometry gives the same focalization when the lens is active or not. a. Lens inactive, 9 trajectories are calculated with an angle at the entry of 6° and an angle exit of 6° . b. Lens active with 576V, the angle at the entry is 6° and the exit is 10° .

4.3.3. M2 mirror

The M2 mirror is designed with an external grounded planar grid, through which the ions enter and exit, and a positively polarized electrode to reflect the ions. The convenient shape of this electrode and the position and inclination of the M2 mirror have to be optimized in order to fulfil the following requirements :

- The image of the FOV at entrance of PICAM in a symmetry plane should extend over the full radius of the useful area of the MCP
- The relationship between the radial distance of the impact location of an ion and its polar angle at entrance in PICAM should be as linear as possible to insure homogeneous pitch-angle measurements.
- The “blurring” of the image due to the energy aberration term should be maintained as small as possible.

As in the case of the ECL, we have performed the first design study using the same initial configuration of the ESA. Several shapes of the reflecting electrode, shown as A1, ...A4 in *Figure V-26*, have been first investigated. The A4 shape was found to provide the best performances. The configuration of the M2 mirror can be easily and automatically adjusted by the numerical modelling code to adapt to the evolution of the ESA geometry during the optimization process and the M2 performances are not substantially modified for slight modifications of the ESA geometry.

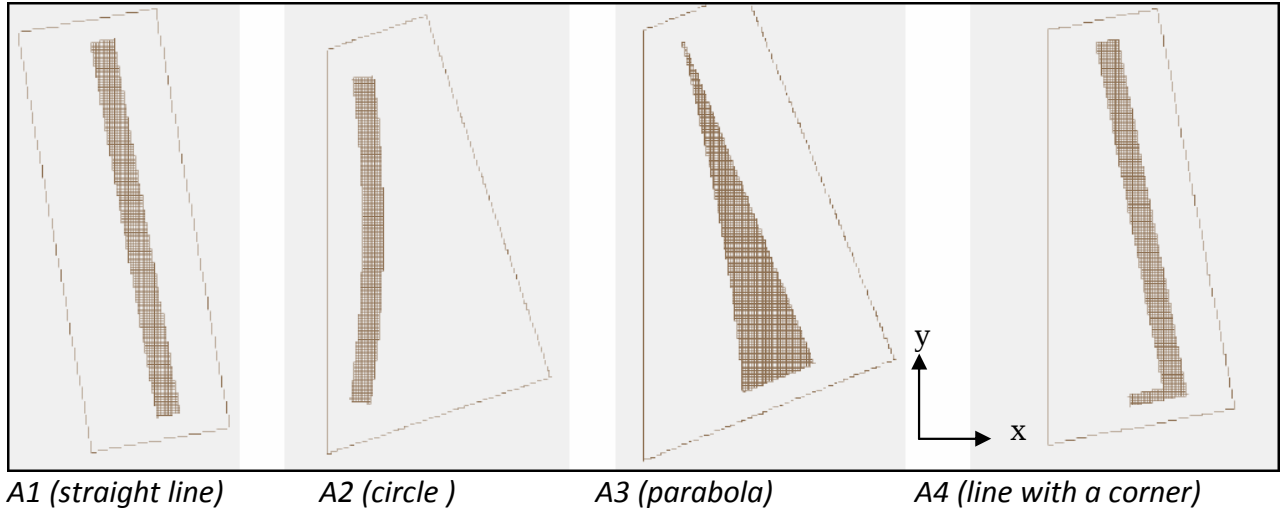


Figure V-26 : The 4 simple shapes of the M2 reflecting electrodes with the position of the rotation X axis of PICAM indicated.

In the last round of optimization we have found that the performances of the M2 mirror can be further improved by a reflecting electrode with the shape shown in *Figure V-27*. The straight part of the electrode is replaced by a convex circular line which allows increasing the size of the image on the detector to about ~20mm along the Y radial axis.

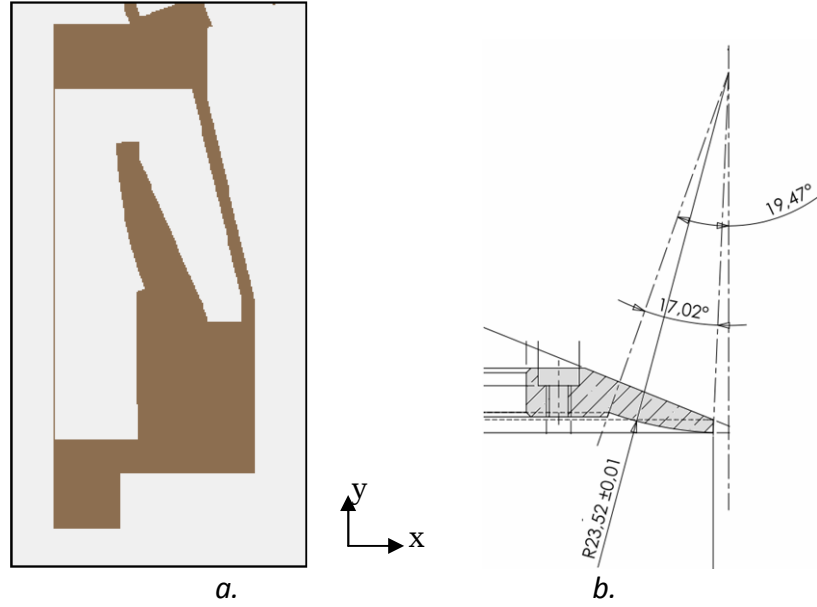


Figure V-27 : a. Section of the M2 mirror in a radial symmetry plane showing the optimized convex circular shape of the reflecting electrode. We simulate the mirror with the technical part added for the prototype. b. View of the mechanical drawing of the mirror M2 with the characteristics of the mirror.

4.3.4. The [ECL + ESA + M2]=EEM subsystem

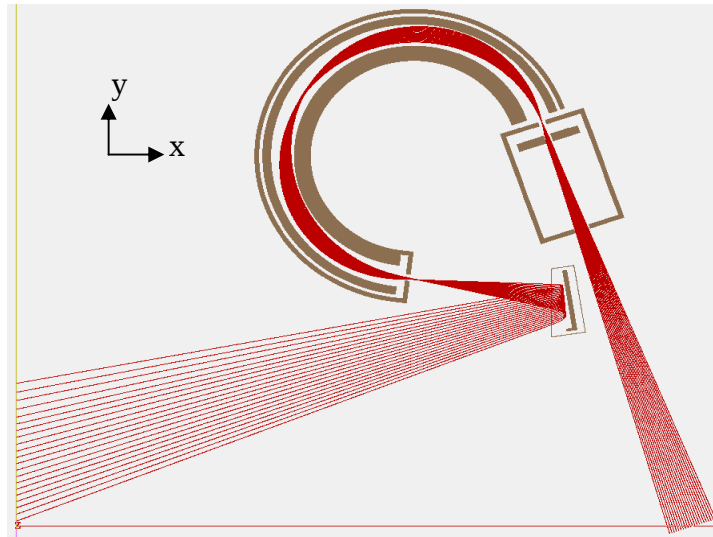


Figure V-28 : Ion trajectories in the [ECL+ESA+M2] subsystem with a focal point at the entry of the ESA and a single energy. For 1 keV ions the potentials are the following : ECL : 350V, ESA : 305V, M2 1200V. The angle of inclination at the entrance is 70.5° and the deflexion of the ESA is 244° .

Shown in Figure V-28 are trajectories of 1 keV ions in the 2D EEM subsystem for ideal conditions where the ions are mono-energetic at 1 keV and all travel through a single focal point at the entrance of the ESA. Each velocity angle at the entrance corresponds to a single impact point on the detector.

In this section we discuss the effects of two parameters, the energy bandwidth of the ion beam and the width of the entrance slit in the ESA, that lead to a degradation of the image through the induced variations of the ion impact position for each velocity angle at entrance. We will also describe, in the second case, the results of the optimization efforts to minimize the image degradation.

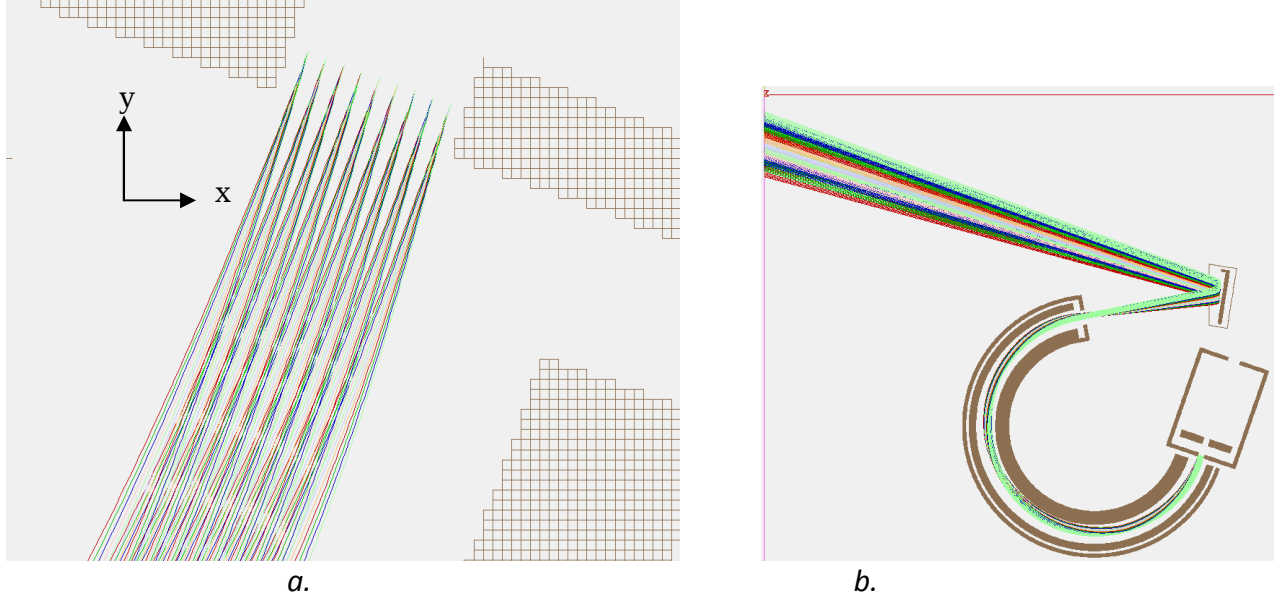
In the configuration displayed in *Figure V-28* we have taken into account an energy bandwidth $\Delta E = 50 \text{ eV}$ ($\pm 25 \text{ eV}$) around the central energy of 1 keV . The impact positions are displaced by $\Delta R \sim \pm 1 \text{ mm}$ with respect to the impact position at 1 keV . With a total radial extent of 20 mm for the image on the detector this $\Delta R \sim \pm 1 \text{ mm}$ corresponds to a resolution $\delta\alpha \sim 0.6^\circ$ ($\pm 0.3^\circ$) on the α angle at the entrance of the ESA and $\delta\beta \sim 8^\circ$ ($\pm 4^\circ$) for the polar angle β at entrance of the instrument since the entrance FOV in polar angle $\Delta\beta \sim 80^\circ$ reduces to a full opening angle $\Delta\alpha \sim 6^\circ$ ($\pm 3^\circ$) at entrance of the ESA. When polarized, the ECL improves the situation (at best by a factor 2) since the effective full opening angle at entrance of the ESA is increased to $\Delta\alpha \sim 10^\circ$ ($\pm 5^\circ$). As a last remark, it can be pointed out that this estimate of the energy aberration term on the resolution of the polar angle at entrance of the instrument is rather optimistic since we have only considered 2D trajectories in a radial symmetry plane. One may thus keep in mind that to maintain an angular resolution at entrance better than $\delta\beta \sim 8^\circ$ ($\pm 4^\circ$) the energy bandwidth should be limited to $\sim 5\%$.

In the previous paragraph we have considered that ions enter the ESA through a single focal point at the centre of the entrance face and with a mean angle with respect to the X axis $\alpha_0 = 70.5^\circ$ and a full opening angle $\Delta\alpha \pm 3^\circ$. In this paragraph we want to study the influence of the width of the entrance slit on the image on the detector. The idea is to determine the maximum width compatible with the measurement requirements in order to maximize the count rate. We therefore modify the entrance conditions by launching ions from 9 positions in the entrance plane centred on the focal point used in the previous study. These 9 positions are separated by 0.1 mm and constitute a 0.8 mm slit. From each position ions are launched with 11 different velocity angles spanning the interval $\alpha_0 \pm 2.5^\circ$ featuring the kind of “focal spot” that can be expected from the operation of an actual M1 mirror. Through each of these 9 points, ions are launched along 11 ion trajectories corresponding to α angles varied by steps of 0.5° with a colour corresponding to each angle as follows :

Angle	color
-2.5°	Red
-2°	Green
-1.5°	Blue
-1°	Pink
-0.5°	Light green
0°	Purple
0.5°	Orange
1°	Red
1.5°	Green
2°	Blue
2.5°	Light green

Tableau 10 : List of colours to define the 11 angles of the entrance of the ESA.

The central one at the mean angle $\alpha_0 = 70.5^\circ$ is shown in purple and the 2 extreme, at $\pm 2.5^\circ$ from this latter, are shown in red and light green in *Figure V-29*. Ideal imaging properties would lead to 11 impact positions on the MCP, one for each entrance angle indicated by a specific colour. This is not the case and some “blurring” of the image occurs.



*Figure V-29 : a. Zoom of the slit entrance with 9 entrance points spanning a total width of 0.8 mm
b. [ESA + M2] response for ions launched with 11 velocity angles with a mean value of 70.5° and spanning $\pm 2.5^\circ$ on either side.*

We have tried to reduce the image aberration due to the width of the entrance slit by playing with 2 geometrical parameters of the ESA :

- The deflexion angle, initially 244°
- The position of the entrance slit in the entrance plane.

The best result is displayed in *Figure V-30* which shows a significant improvement of the imaging properties of the [ESA + M2]. The deflexion angle was reduced from 244° to 241° and the entrance slit moved towards the internal electrode by 0.2 mm.

On the MCP, the impact positions of trajectories corresponding to an entrance angle α are well separated from the impact positions of the trajectories corresponding to $\alpha \pm 2.5^\circ$. But the starting point of particles is not on a zero field, because the positive electrode of the ESA is closed. The calculated trajectories will not be then the same if we launch from the input of mirror M1.

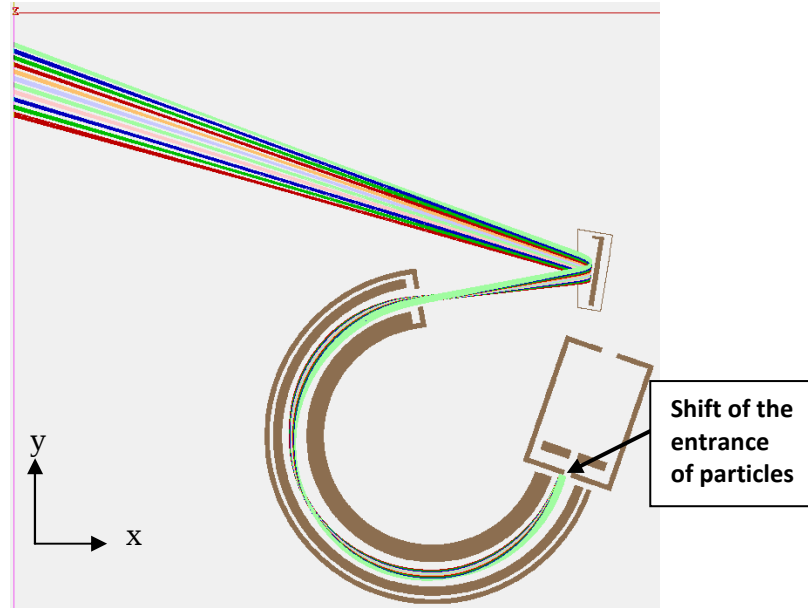


Figure V-30 : Ion trajectories and image on the detector for the optimized [ESA+M2] subsystem. The deflexion angle of the ESA is reduced from 244° to 241° and the 0.8 mm entrance slit is displaced by 0.2 mm towards the internal electrode of the ESA. The colors correspond to *Tableau 10*

For shifting the input in the ESA, the lens is moved relative to ESA by 0.2mm. To avoid taking a departure of ions in an environment that is a zero field, we choose to release the ions from the axis of rotation of the instrument ($Y = 0$). The following figure shows the result after a shift of the lens by 0.2mm compared to ESA. Each colour on the detector corresponds to 11 angles entries as shown in *Tableau 10*. The result is shown in *Figure V-31* where the angular resolution $\delta\alpha$ is still $\sim 0.5^\circ$ as in the idealized case with no open slit displayed in *Figure V-30*.

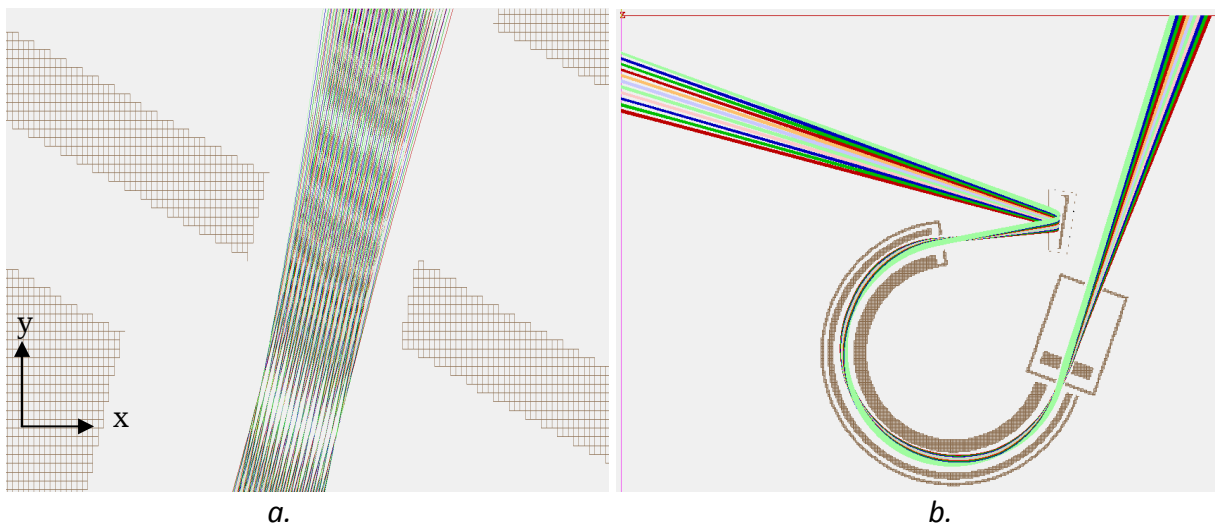


Figure V-31 : a. Zoom of the ion trajectories through the ESA entrance slit. b. Image on the detector showing a resolution $\delta\alpha \sim 0.5^\circ$ for 11 ion velocity angles centred around a mean direction at 70.5° to the X axis and spanning an angular range $\Delta\alpha = \pm 2.5^\circ$

The EEM section of the ion optics is thus optimized except for the extent of the image in a radial plane on the detector. As indicated above, this last problem was resolved by modifying the shape of the reflecting electrode in the M2 mirror. The straight section of the electrode in a radial symmetry plane is changed to a convex circular line while keeping the corner and the small perpendicular segment. The optimization of the parameters of the circular part (position of the center and radius) as well as the applied potential lead to the ion trajectories and detector image represented in Figure V-32 which shows that the final EEM sub-system produces an image of the desired size and with an angular resolution $\delta\alpha \sim 0.5^\circ$ corresponding to $\sim 8^\circ$ for the polar angle at entrance of PICAM. The last step of the optimization will be to assemble the M1 mirror with the EEM.

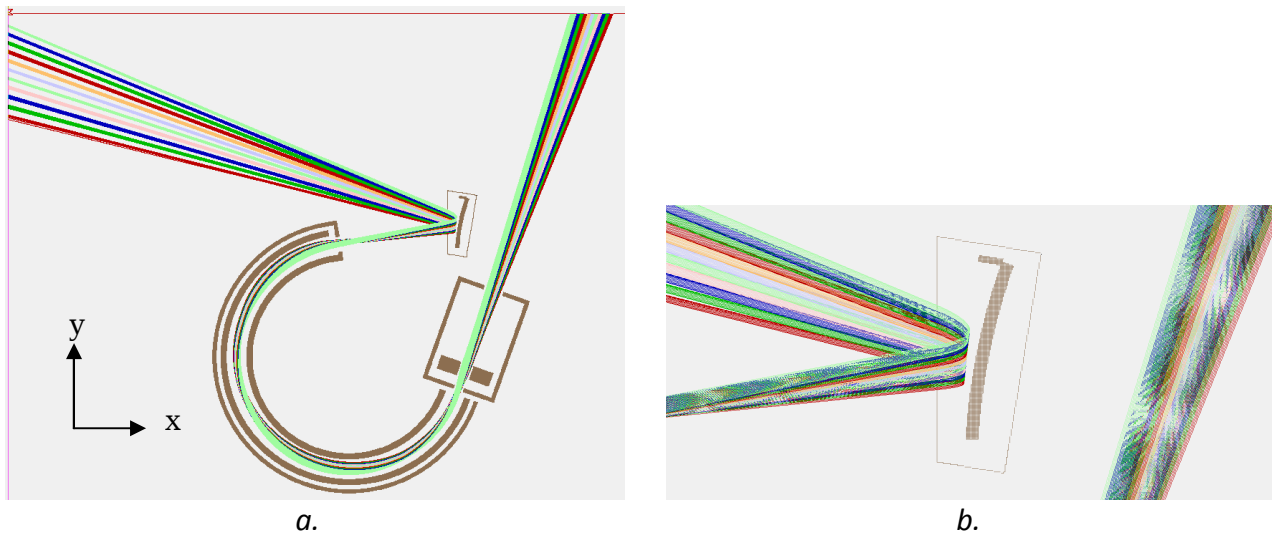


Figure V-32 : a. View of the optimized EEM section of the ion optics. b. Zoom of the M2 mirror, the convex retarding electrode increases the image on the detector to $\sim 18\text{mm}$ along a radial direction parallel to the Y axis.

4.4. TOF Simulation

To determine the time of flight of the incoming particles, we use the gating electrodes. We apply a potential of $\pm 30\text{V}$ on these electrodes to cut the beam. The door is then opened during 25 ns (electrodes at 0 V).

Considering the time t_0 , as the start time of the particles at the entrance of the mirror M1, the gating electrodes are polarized at $V_g = \pm 30\text{V}$. We launched particles even with such potential. No particles can reach the detector. At a time $t_0 + \Delta t$ we polarize the gate at $V_g = 0\text{V}$. Only those particles which were close enough to the gate will be able to reach the detector by passing through the gate. As a consequence, we are able to define a region close to the electrodes of gating which will contain those particles able to reach the detector. This region is defined along the Y axis. We call it " impact space ". Shown in Figure V-33, the " impact space " is 5.6mm around the gating electrodes for ions at 1keV .

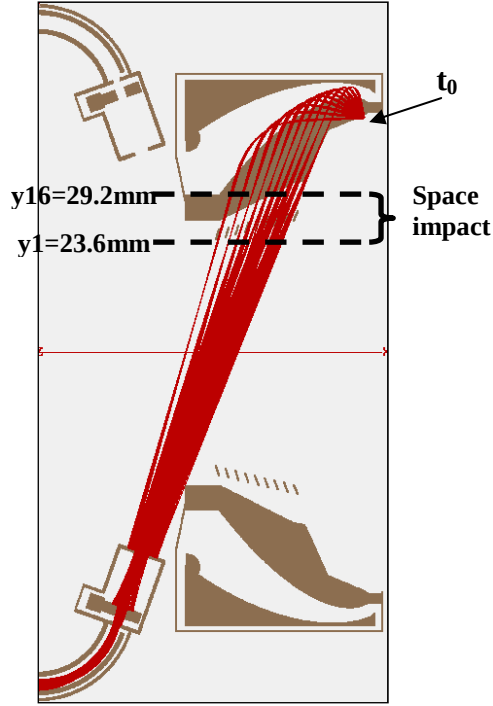


Figure V-33 : View of the 3D model with the gating electrodes to determine the mass of ions. The "impact space" corresponds to the region close to the gate where all ions that could reach the detector are placed just at the moment of the gate opening.

We divide the "impact space" into 16 bins separated by 0.4mm. Particles are launched from the input mirror M1 at time t_0 with $V_g = + / -30V$. When the particle reaches the position corresponding to the first position of the "impact space", we polarize V_g to 0V and record the time t_1 . The gate electrodes are maintained at 0V during 25ns and repolarized at $V_g + / -30V$ after that duration. The time of flight of the particle before reaching the detector is then recorded. The same approach is repeated for each of the 16 bins (a particle is launched from the entrance slit and the gates are opened when it reaches the second bin in the "impact space"). A large range of particles are launched from the entrance slit to cover the whole energy bandwidth, azimuthal FOV and elevation FOV.

4.5. PICAM modelling with the new version of SIMION® software

During the development described in the previous sections, a new version of SIMION® became available which allows to model the whole PICAM in 3D. It was then possible to model the entire instrument with a resolution of 0.066mm of mesh size without the need to develop 2D/3D interfaces and/or the introduction of potential edges in the 3D modelling of mirror M1. Figure V-34 shows a view of the simulation model as it has been possible to do with this new version of SIMION®.

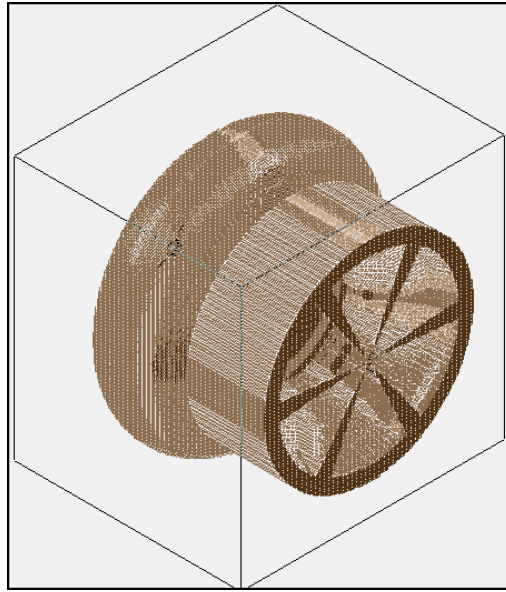


Figure V-34 : View of the 3D modelled of PICAM with SIMION®.

To make a comparison between the coupled 2D/3D model and the full 3D model, we define the area of the detector consisting of pixels from A to F. Figure V-35 shows how the sector is defined on the detector.

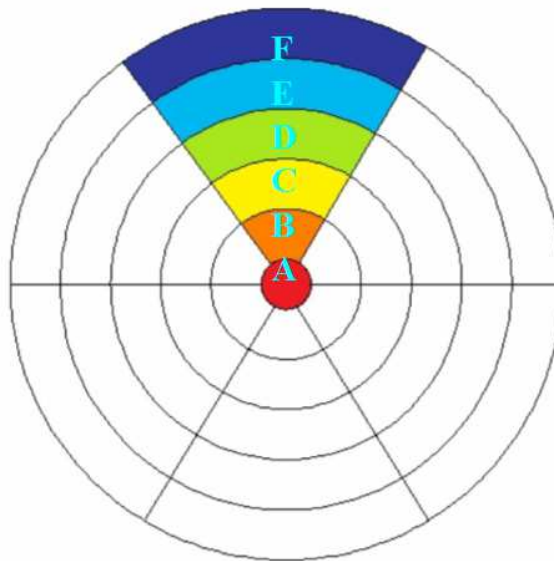


Figure V-35 : Definition of the pixels of the sector for the simulations

A study was realized to determine whether the previous developments were correct and did not induce errors in the simulated properties of PICAM. Figure V-36 shows such comparison.

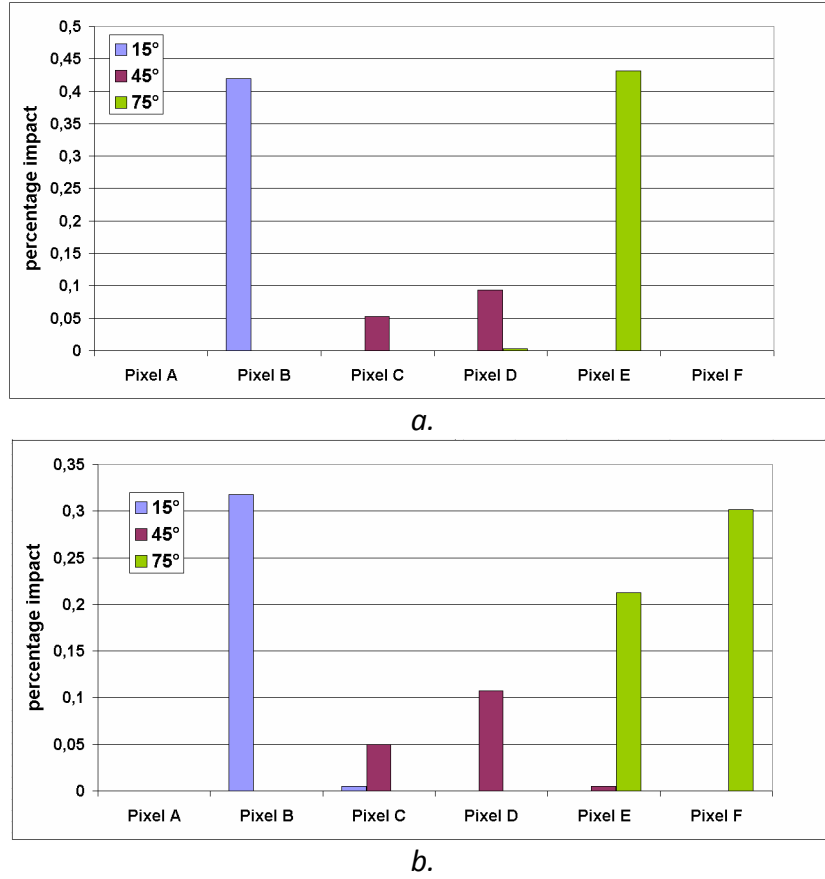


Figure V-36 : Comparison between the model coupling 3D and 2D modelling of PICAM (described in section 4) and the 3D global model of PICAM for three directions in elevation at the entrance of the instrument from the PICAM axis. a. Coupled model. b. Global model in 3D.

The results shown in Figure V-36 suggest that globally the simulated distribution of the impacts on the detector do not change significantly between the fully 3D simulation and the 3D/2D model. This is true for the 3 directions displayed in Figure V-36 (15°, 45° and 75° in elevation at the entrance). However, the fully 3D model also simulated a large number of impacts on pixel F whereas the 3D/2D model simulated none. Pixel F covers the angular range for particles entering perpendicular to the instrument axis X. Despite these differences, the comparison between the two models is very good and confirms that PICAM optimization based on the 3D/2D model should provide the right improvement of this instrument.

4.6. Overall Performances of PICAM

In the following, we present the global performances of PICAM as calculated using the global 3D model of PICAM described in section 4.5 of chapter V.

In our simulations, the energy of particles is nominally 1 keV. In reality, there will be a given energy bandwidth that is going to reach the detector. To determine this bandwidth, we launch particles with energy in a range of + / -10% of the nominal energy. Figure V-36 below shows the distribution of particles that reach the detector with respect to their initial energy.

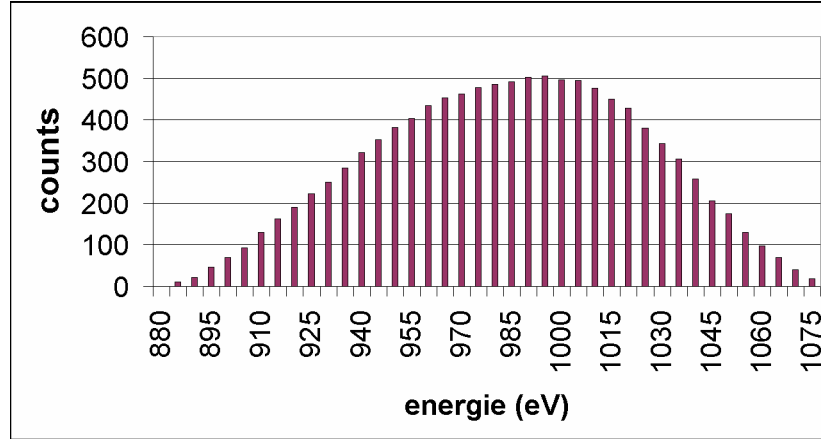


Figure V-36 : Energy distribution of the particles reaching the detector. Launches with $\pm 10\%$ energy of the nominal 1 keV energy by step of 10 eV have been simulated. A slit of 0.5 mm, with a 0° - 80° in elevation by step of 2° and for an $\pm 15^\circ$ aperture in azimuth by step of 1.5° have been used to define the population of particles at the entrance of the instrument.

The time of flight of particles was simulated as described in section 4.4. Figure V-37 shows the time of flight calculated for oxygen atoms and H_2O molecules. Figure V-38 represents the same calculation for two particles with masses 23 and 24. From these calculations, a resolution in mass larger than 24 is expected.

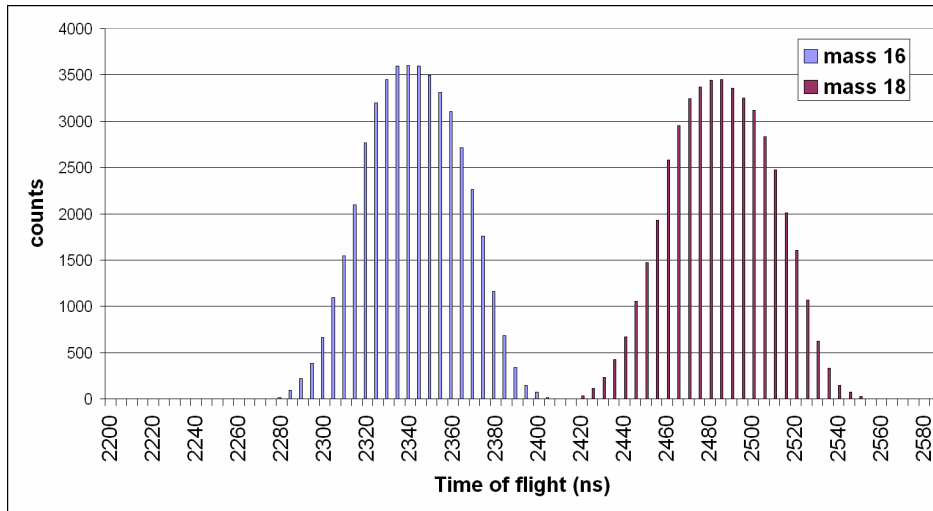


Figure V-37 : Distributions of the time of flight of oxygen atoms and H_2O molecules. Launches with $\pm 10\%$ energy of the nominal 1 keV energy by step of 10 eV have been simulated. A slit of 0.5 mm, with a 0° - 80° in elevation by step of 2° and for an $\pm 15^\circ$ aperture in azimuth by step of 1.5° have been used to define the population of particles at the entrance of the instrument. More than 3 millions of particles for each mass were simulated.

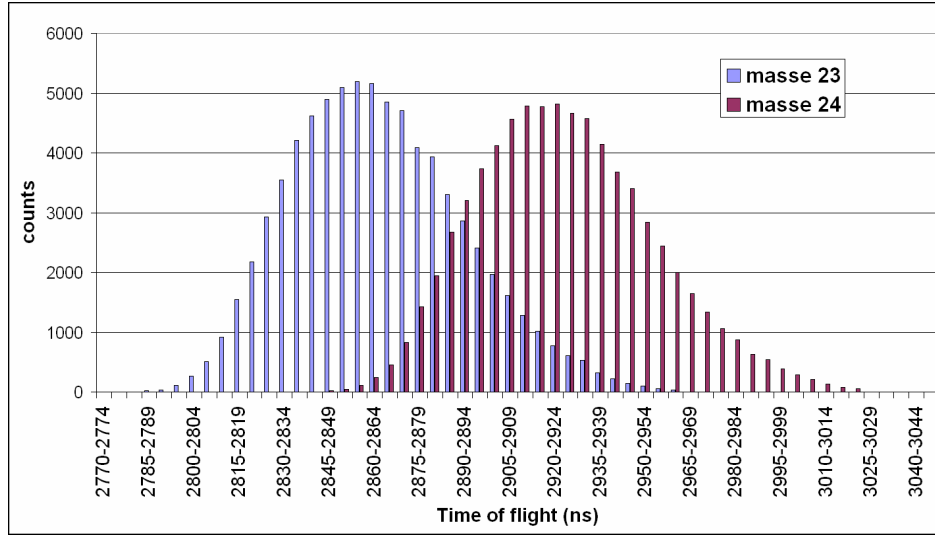
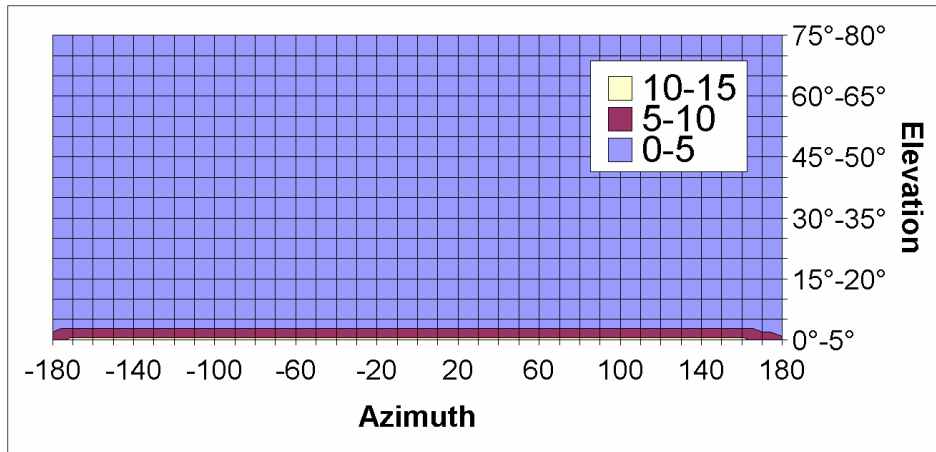


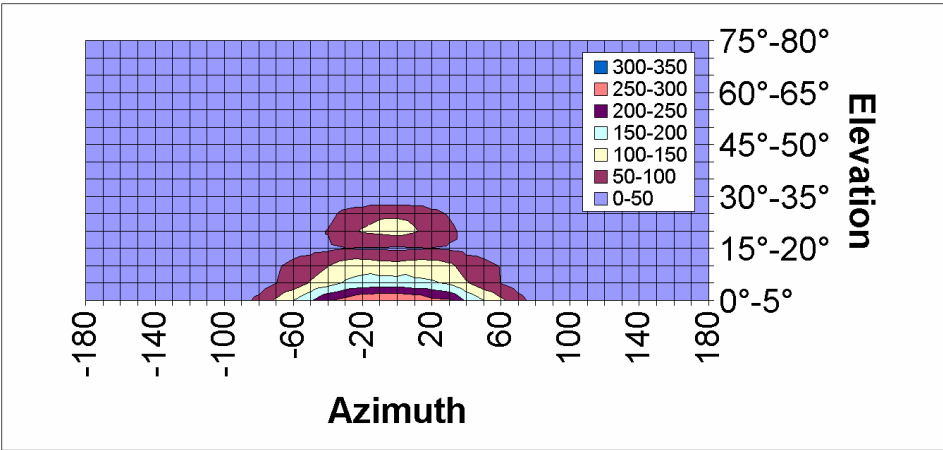
Figure V-38 : Distributions of the time of flight of particles of masses 23 and 24. Launches with $\pm 10\%$ energy of the nominal 1 keV energy by step of 10eV have been simulated. A slit of 0.5mm, with a 0° - 80° in elevation by step of 2° and for an $\pm 15^\circ$ aperture in azimuth by step of 1.5° have been used to defined the population of particles at the entrance of the instrument. More than 3 millions of particles for each mass were simulated.

The third expected performance of PICAM is an angular resolution in both azimuth and elevation. We therefore look at the field of view of each pixel of the detector (Figure V-35). The instrument being axi-symmetric, we just need to look at the field of view of a set of pixels along an azimuthal sector.

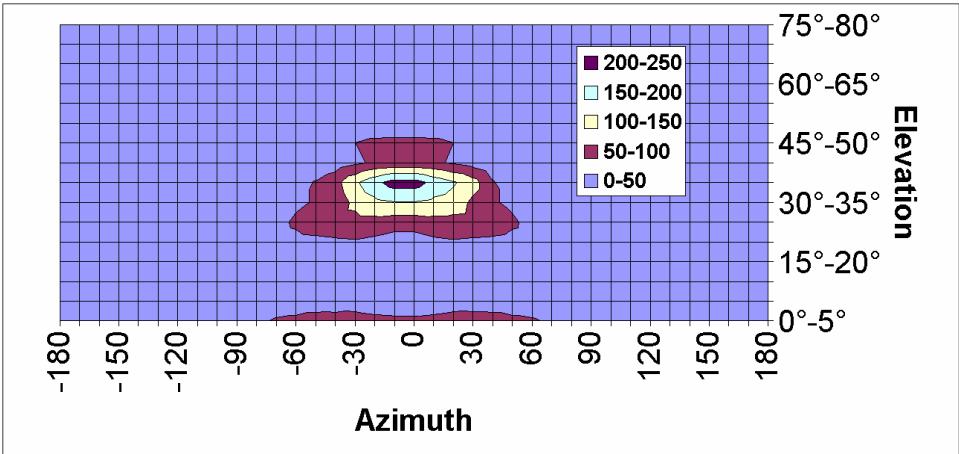
Figure V-39 displays such field of view for each pixel.



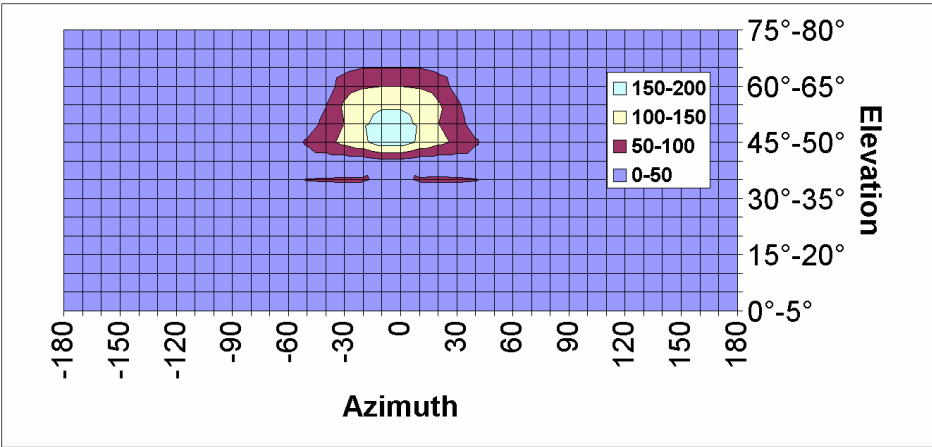
a.



b.



c.



d.

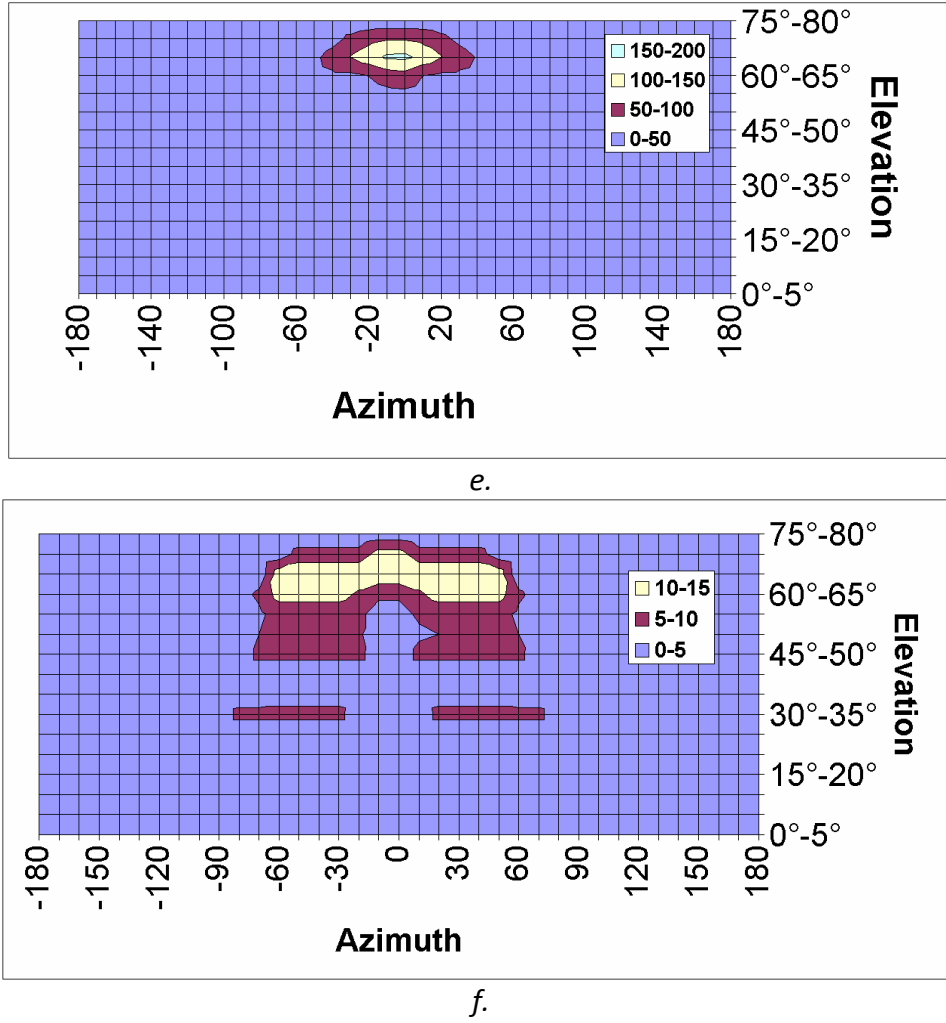


Figure V-39 : Field of view for pixels A (panel a), B (panel b), C (panel c), D (panel d) E (panel e) and F (panel f) between the elevation of 90° with the PICAM axis and the azimuth of 360° of the instrument. A slit of 0.5mm, with a 0°-80° in elevation by step of 2° and for an +/-15° aperture in azimuth by step of 1.5° have been used to defined the population of particles at the entrance of the instrument. The different colors in each panel correspond to the number of particles reaching the detector.

Figure V-39 demonstrates that in elevation a resolution of $\sim 15^\circ$ should be achieved.

At the end, it is also possible to determine the geometrical factor of PICAM. The main characteristics of the instrument are :

- Width of the entrance slit = 0.50 mm
- Radius of the entrance slit = 47.53 mm
 $\Rightarrow$ Entrance surface (taking into account blades and guard angle) $S = 112.2 \text{ mm}^2$
- Azimuthal acceptance angle $\Omega_{az} = 30^\circ$
- Solid angle $\Omega = 2\pi \times 80^\circ/90^\circ = 1.78\pi$
- $\Delta E/E = 9\%$
- Total transparency $T = 2.25\%$

The geometrical factor is then defined as $G_{\text{eff}} = \Omega_{\text{az}}/360^\circ \times S \times \Omega \times T \times \Delta E/E$ and is equal to $G_{\text{eff}} = 1.3 \times 10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ sr eV/eV}$

5. Testing and initial results

PICAM QM was built following the results of the numerical optimization described in section 4 of chapter V. It is currently tested at IWF in Graz (Austria). *Figure V-40* shows the mechanic drawing and a picture of the QM during tests.

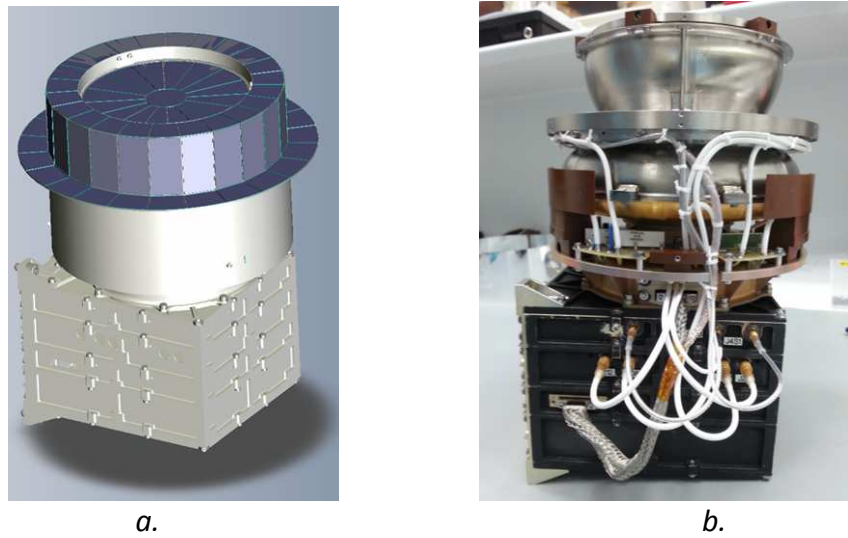


Figure V-40 : a. Schematic view of PICA. b. Picture shows the only partially assembled QM, without housing.

Preliminary comparisons between the results of our simulation and these tests were possible and are described in the following. *Figure V-41* shows the distribution of impacts on the detector of N_2^+ ions launched at an elevation of 45° with a nominal energy of 1keV. The image on the detector corresponds to the image obtained by simulation for the elevation distribution but the measurements appear much more dispersed than in the simulation. A first explanation is related to the use of non-nominal potentials in this first set of tests.

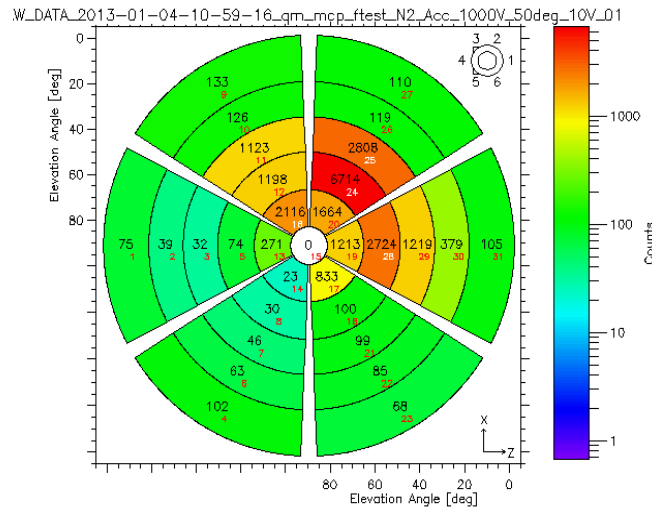
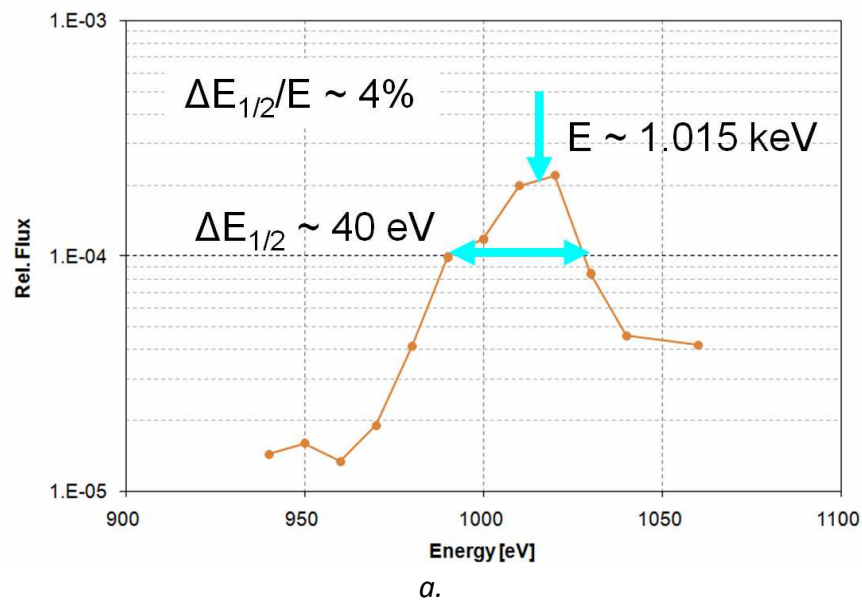
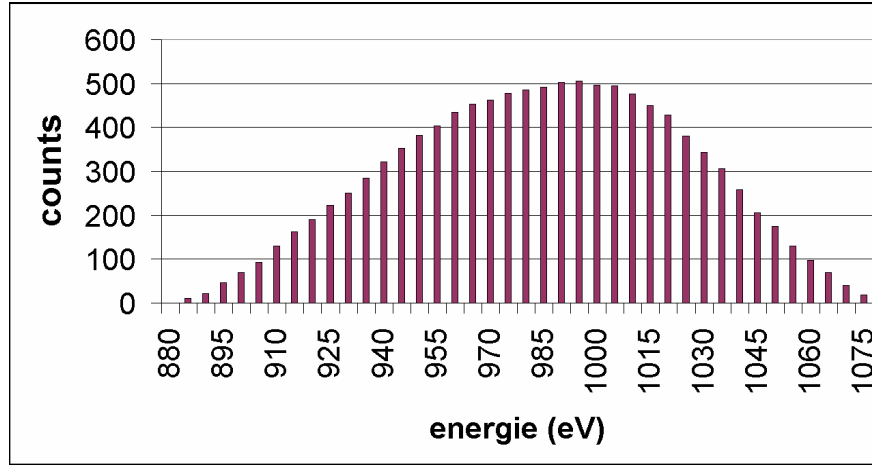


Figure V-41 : Image of half-sphere field of view on PICAM detector. The colour scale is for counts, also given inside the pixels as the larger letters.

A measurement of the energy bandwidth was also possible during these tests. Figure V-42.a displays the results of this measurements and the results of the corresponding simulations is given in Figure V-42.b. The result of the simulation is consistent with the measurement knowing that the measurements were performed with a narrower range of angles.

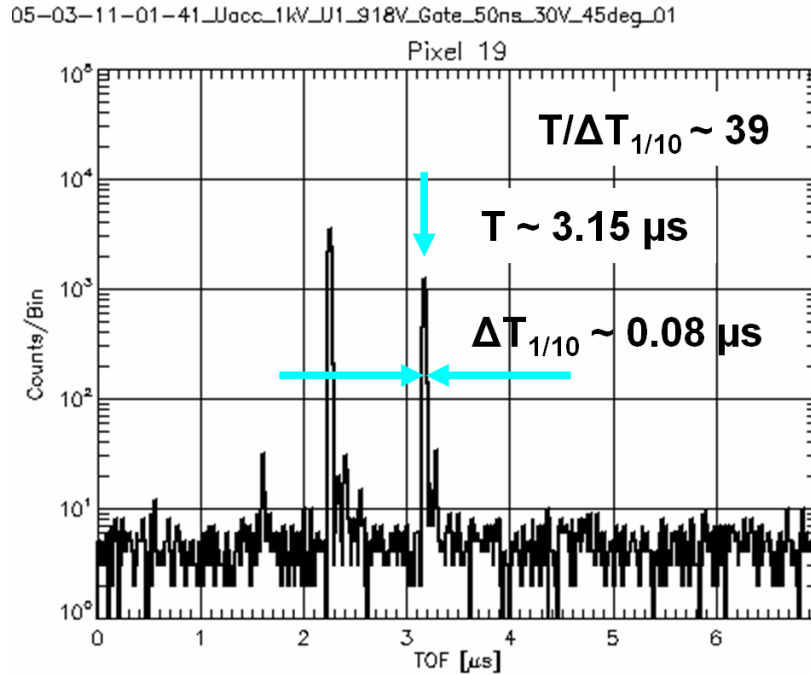




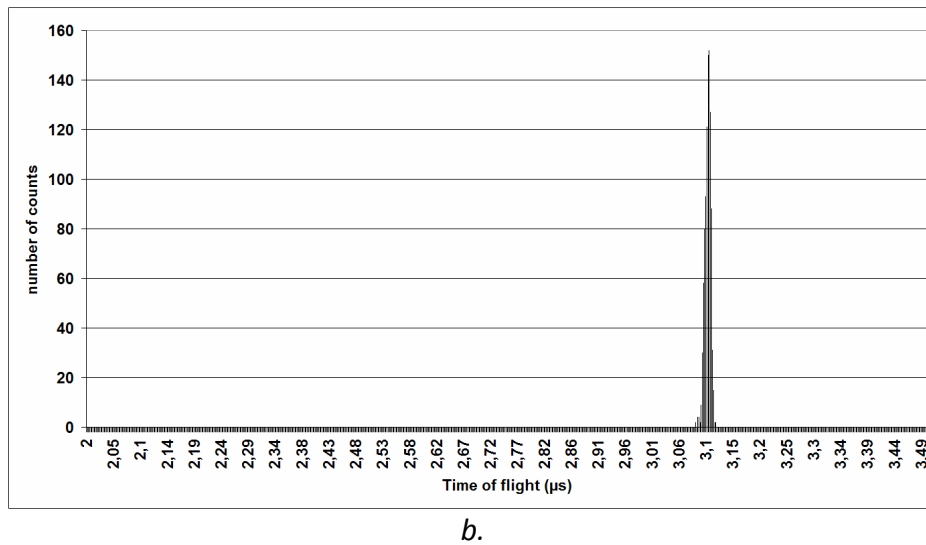
b.

Figure V-42 : a. Measured energy bandwidth for N_2^+ ions at ~ 1 keV, 45° in elevation and $\pm 0.25^\circ$ in azimuth. b. Numbers of counts as a function of the energy for ions N_2^+ at ~ 1 keV and a FOV of 90° in elevation and 30° in azimuth.

A measurement of the time of flight for N_2^+ ions with energy of 1 keV and a $\sim 45^\circ$ elevation was also performed using a gating electrodes opening time of 50 ns (larger than the nominal value of 25 ns defined in section 4). Figure V-43.a displays the results whereas Figure V-43.b shows the results of a simulation with the same parameters, a gate with 50 ns aperture, a potential of ± 30 V and ions at 45° in elevation and a FOV of 0.5° in azimuth at 1 keV with no energy dispersion.



a.



b.

Figure V-43 : a. Counts on the relevant pixel as function of TOF in ms of N_2^+ ions at ~ 1 keV with an entrance at 45° in elevation and $\pm 0.25^\circ$ in azimuth. b. TOF simulated for close conditions.

The resolution obtained with the simulation, $T/\Delta T_{1/10} \sim 140$. Figure V-43.a also shows a second peak at about $2.1 \mu s$. This peak is due to N^+ particles entering the instrument and formed from the dissociation and ionization of the N_2 molecules in the ionization source of the test. In the simulations, such particles were not simulated. For the N_2^+ peak, the time of flight measured is $\sim 3.15 \mu s$ whereas the simulation calculated $3.11 \mu s$. This excellent agreement suggests that the model relatively well reproduces the real instrument. A better mass resolution in the simulation can also be explained by the perfectly peaked energy distribution used in the simulation with respect to the measurements. A larger energy bandwidth should degrade significantly the final mass resolution (Figure V-37).

Summary of the chapter V

From the model of the instrument DION developed for the Phobos-Grunt mission to Mars (Vaisberg et al. 2010), a long and complex work of simulation has been realized in order to modify the original convex-concave shape of the first mirror of DION into a concave-concave shape. From this major change of the DION concept, an optimization work was needed to obtain a final mass resolution of ~ 30 and an angular resolution of 15° in elevation and 30° in azimuth.

The final concept of PICAM that will be part of Bepi-Colombo payload consists of two parts, an electrostatic optics focusing the nominal elevation aperture of 90° into a 6° solid angle, and an electrostatic imaging optics to realize the angular image of the incident particles. A first model of the instrument was realized by separating these two parts into a 3D model (for the focusing optic) and 2D model (for the imaging optic). Gating electrodes to realize the time of flight measurement of the mass are also included and modeled in 3D. A second model fully 3D from the entrance of the instrument up to the detector was possible thanks to a new SIMION[®] version allowing much larger number of cells. This second model confirmed the accuracy of our first model and of its optimization.

The performances of PICAM were simulated and were conforming to the expectations. Based on that modelling, PICAM was built and tested in Graz (Austria). A first set of measurements provided results in relatively good agreement with the simulation. This model of PICAM will be essential for the validation of PICAM and the future exploitation and calibration of PICAM measurements of Mercury's environment.

VI. Conclusions et perspectives

Au cours de ma thèse, j'ai eu l'occasion de travailler sur deux spectromètres de masse. Le premier, NIMEIS premier prototype d'un instrument de nouvelle génération, vise à mesurer les particules supra-thermiques et thermiques de l'exosphère de Mars et de Ganymède. Le second, PICAM, qui fera partie de la mission Bepi-Colombo, a pour objectif de mesurer les ions planétaires dans l'exosphère de Mercure.

NIMEIS est un spectromètre de masse pour l'analyse des neutres et ions, composé d'une source d'ionisation basée sur le principe d'ionisation par impact électronique et utilisant des nanotubes de carbone comme émetteurs d'électrons. Il est composé d'une optique d'analyse des ions formés donnant une image en énergie et en masse. Le développement de ces deux parties s'est fait indépendamment mais a pour finalité de constituer un prototype complet de spectromètre de masse et d'énergie neutre.

L'optique a été définie à partir d'un modèle numérique en utilisant le logiciel d'optique électrostatique SIMION®. Le concept novateur de cette optique consiste à utiliser un réflectron comme analyseur en masse ce qui se fait originellement, mais aussi de réaliser une distribution en énergie. Cette double analyse se fait le long de deux axes sur un détecteur plan. L'analyse de la masse par temps de vol se fait par l'intermédiaire d'un déflecteur à l'entrée du réflectron qui permet d'associer la position de l'impact sur le détecteur selon l'axe des masses avec le temps "start" correspondant au moment de passage de l'ion au niveau du réflectron, le temps "stop" étant défini par le moment de l'impact de l'ion sur le détecteur. Ce concept est un héritage de l'instrument STROFIO (Orsini et al. 2010). Un ensemble de trois optiques est placé à l'entrée de l'optique, permettant de réaliser la jonction entre la sortie de la source d'ionisation et l'entrée dans le réflectron. Le modèle numérique donne des résultats avec une résolution en masse (<30) en mesurant le temps de vol sans utiliser le déflecteur, et en énergie ($\sim 0.5\text{eV}$ sur une bande passante entre 5 et 15 eV). Des évolutions envisageables de l'optique sont par exemple le rajout de diaphragmes entre les optiques dans le but d'empêcher les particules de faible énergie ($<0.1\text{eV}$) de l'atmosphère résiduelle du satellite d'atteindre le détecteur ou encore de réduire le chemin optique de l'instrument entre la source d'ionisation et le réflectron en enlevant les lentilles de focalisation dans les deux plans. Ces améliorations pourront être étudiées à la suite des premiers tests sur le prototype.

Le prototype de NIMEIS a ensuite été développé au LATMOS, monté et placé dans une chambre d'essai pour effectuer les tests. Un détecteur de temps de vol et de positionnement a également été élaboré au laboratoire, utilisant un système de deux MCP de manière à transformer les ions en une gerbe d'électrons qui sera détectée par le détecteur temps de vol puis par le détecteur de positionnement. Les premiers tests de bruit montrent que la fonction de transfert du détecteur de positionnement n'est pas tout à fait optimale. Une étude électronique du détecteur pourra être réalisée afin de pallier à ces défauts. Des tests de mesure en énergie ont été réalisés,

mettant en évidence le fonctionnement du concept de l'instrument. L'ajout des trois grilles à l'entrée de l'optique d'accélération a permis de contrôler l'énergie des particules injectées dans le spectromètre mais a entraîné une défocalisation des ions sur le plan du détecteur. Une optimisation des potentiels d'accélération devrait corriger ce défaut. Le déplacement de l'énergie selon l'axe des énergies sur le détecteur en fonction de la variation de l'ensemble V_p/G_2 est toutefois constaté. Des tests de variation de position selon l'axe des masses, utilisant le déflecteur, n'ont pu que partiellement être réalisés. La rectification des potentiels de l'optique d'accélération pour une meilleure focalisation sur le détecteur ainsi que la correction du problème sur l'amplificateur temps de vol devraient permettre de réaliser des mesures de temps de vol plus conformes à nos attentes.

Le développement de la source d'ionisation basé sur le concept d'extraction d'électrons par effet de champ sur des nanotubes de carbone a été réalisé en collaboration avec le professeur Lee et le docteur Nguyen Tuan de Ajou University en Corée du Sud. Le principe d'extraction des électrons par effet tunnel entre une pointe de nanotube de carbone et une grille peut donner lieu à la définition d'une source d'ionisation de basse consommation et de grande sensibilité (probabilité d'ionisation importante). Dans ce but, un premier montage a été réalisé à partir des résultats de simulations. Ces derniers montrent que l'utilisation de colonnes de nanotubes de carbone (d'un diamètre de $250\mu\text{m}$), placées à une distance proche d'une grille ($\sim 100\mu\text{m}$), ne donne pas de bons résultats car la transparence du système est faible et les potentiels d'extraction sont trop forts pour obtenir des électrons d'une énergie moyenne d'environ 150eV . Un travail de simulation visant à comprendre les résultats obtenus en étudiant les trajectoires des électrons a été ensuite réalisé. Ces résultats, qui ont été résumés dans un article en cours de soumission, montrent que l'émission des électrons se produit à partir de nanotubes de carbone (diamètre de $\sim 50\text{nm}$) sortant de la colonne de CNT (diamètre de $250\mu\text{m}$) sur les bords des CNT. Les trajectoires des électrons sont ensuite influencées par les lignes de champ sur les bords des colonnes de CNT et sont dirigées vers la grille d'extraction.

Un nouveau modèle d'extraction a été conçu à partir de l'utilisation d'une surface plane de CNT sur laquelle est posée une grille se trouvant au même potentiel que les CNT. Cette grille va jouer le rôle de lentille de focalisation et va réduire le nombre d'impacts d'électrons sur la grille d'extraction. Ce modèle donne des courants satisfaisants sur le collecteur avec des potentiels d'extraction encore un peu élevés mais se rapprochant de nos objectifs. Un nouveau modèle, en cours de fabrication, permettra de réaliser une mesure de l'énergie des électrons. Nous aurons alors une caractérisation complète de cette source. De ce modèle d'extraction sera définie et développée la source d'ionisation qui sera ensuite couplée à NIMEIS.

La suite de cette thèse consistera à utiliser l'ensemble de ces tests afin d'optimiser, de corriger et de déterminer les performances optimales de NIMEIS. Enfin, le développement d'une source d'ionisation basée sur l'utilisation de nanotubes de carbone permettra de la tester en la couplant à l'optique de NIMEIS.

L'instrument PICAM, de la mission Bepi-Colombo, a pour objectif de mesurer les ions de l'exosphère de Mercure dans une gamme d'énergie de quelques eV à plusieurs keV avec une résolution en masse de l'ordre de 50. La particularité de cet instrument réside dans le fait de pouvoir observer un hémisphère et de donner une image en angle des particules entrant dans

l'instrument. Le design de l'instrument est un héritage de DION (Vaisberg et al. 2010), composé d'un miroir de forme parabolique à symétrie cylindrique (M1), d'un analyseur en énergie (ESA) et d'un miroir de réflexion (M2). L'instrument est défini autour d'un axe de rotation lui permettant de voir sur 2π stéradians. PICAM suit la même géométrie mis à part le positionnement du miroir M1 de manière à ce qu'il soit concave en azimuth et en élévation, le rajout d'une lentille de focalisation (ECL) à l'entrée de l'analyseur en énergie et l'optimisation de la forme de M2. Un travail de modélisation de l'optique de PICAM a été mis en place afin de définir l'ensemble de ces modifications rendues nécessaires par l'adaptation du concept de DION à un environnement bien moins dense autour de Mercure.

Mon travail a consisté à réaliser un modèle numérique complet de l'instrument et surtout à optimiser les optiques pour obtenir une résolution angulaire acceptable et une surface d'entrée de taille raisonnable (fente d'entrée de l'instrument). L'optimisation de l'optique s'est faite en deux parties indépendantes, le miroir M1 d'une part et la lentille de focalisation, l'analyseur et le miroir M2 de l'autre. Le miroir M1 est composé d'une électrode polarisée et d'une électrode à la masse composée de lamelles jouant le rôle de grille. Comme le miroir M1 est de forme parabolique, la grille empêchant les lignes de champ de se propager dans l'instrument doit également être de forme parabolique. La complexité de cette réalisation entraîne la définition de lamelles d'épaisseur et d'espace autour de l'axe de rotation, de formes paraboliques. Cette géométrie m'a contraint à modéliser cette optique en 3D. Un programme d'optimisation m'a ensuite permis de modifier la géométrie du miroir M1 et les lamelles de manière homothétique puis de définir une géométrie idéale. L'optimisation du groupe lentille de focalisation, analyseur en énergie et miroir M2 m'a conduit à réaliser un modèle complet de l'instrument. La mesure du temps de vol se fait par l'ouverture d'une porte formée d'électrodes qui laisse entrer les particules dans l'instrument. Le temps entre la porte et l'impact sur le détecteur donne la mesure de la masse. La porte est placée sur la trajectoire des ions entre le miroir M1 et la lentille de focalisation. L'optimisation de la forme (transparence et résolution en temps de vol) de la porte permet d'obtenir une résolution en temps de vol de ~ 50 et une transparence de 2.25% à partir d'une fente d'entrée de 0.5mm. Les mesures réalisées sur le QM de PICAM au laboratoire IWF à Graz en Autriche ont permis de vérifier et de prouver le bon fonctionnement de l'instrument. La comparaison entre le QM et le modèle numérique a aussi été possible et a montré le bon accord entre les tests et le modèle numérique. Celui-ci servira par la suite à l'exploitation des données de cet instrument.

Bibliographie

- Acunà, M.H., Connerney, J.E.P., Ness, N.F., Lin, R.P., Mitchell, D., Carlson, C.W., McFadden, J., Anderson, K.A., Rème, H., Mazelle, C., Vignes, D., Wasilewski, P., Cloutier, P. Global Distribution of Crustal Magnetization Discovered by the Mars Global Surveyor MAG/ER Experiment. *Par, Science*, 284, (1999).
- Allen, L.V. thesis Design and Utilization of a Top Hat Analyzer for Hall Thruster Plume Diagnostics. University of Michigan (2006).
- Baker, J.E, Adaptive selection methods for genetic algorithms, Proceeding of the first International Conference on Genetic Algorithms and Applications, In : Grefenstette, J.J. (ed.), New Jersey, Lawrence Erlbaum : Hillsdale, 100, (1985).
- 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, Rosetta orbiter spectrometer for ion and neutral analysis-rosina. *Advances in Space Research*, 21, 1527, (1998).
- Balsiger, H., K. Altwegg, P. Bochsler, P. Eberhardt, J. Fischer, S. Graf, A. Jäckel, E. Kopp, U. Langer, M. Mildner, J. Müller, T. Riesen, M. Rubin, S. Scherer, P. Wurz, S. Wüthrich, E. Arijs, S. Delanoye, J. De Keyser, E. Neefs, D. Nevejans, H. Rème, C. Aoustin, C. Mazelle, J.-L. Médale, J. A. Sauvaud, J.-J. Berthelier, J.-L. Bertaux, L. Duvet, J.-M. Illiano, S. A. Fuselier, A. G. Ghielmetti, T. Magoncelli, E. G. Shelley, A. Korth, K. Heerlein, H. Lauche, S. Livi, A. Loose, U. Mall, B. Wilken, F. Gliem, B. Fiethe, T. I. Gombosi, B. Block, G. R. Carignan, L. A. Fisk, J. H. Waite, D. T. Young, H. Wollnik, Rosina-Rosetta Orbiter Spectrometer for ion and neutral, *Space Science Reviews* 128, 745, (2007) .
- Barabash, S., R. Lundin, H. Andersson, J. Gimholt, M. Holmström, O. Norberg, M. Yamauchi, K. Asamura, A.J. Coates, D.R. Linder, D.O. Kataria, C.C. Curtis, K.C. Hsieh, B.R. Sandel, A. Fedorov, A. Grigoriev, E. Budnik, M. Grande, M. Carter, D.H. Reading, H. Koskinen, E. Kallio, P. Riihela, T. Säles, J. Kozyra, N. Krupp, S. Livi, J. Woch, J. Luhmann, S. McKenna-Lawlor, S. Orsini, R. Cerulli-Irelli, M. Maggi, A. Morbidini, A. Mura, A. Milillo, E. Roelof, D. Williams, J.-A. Sauvaud, J.-J. Thocaven, T. Moreau, D. Winningham, R. Frahm, J. Scherrer, J. Sharber, P. Wurz and P. Bochsler, Aspera-3: Analyser of Space Plasmas and Energetic Ions for Mars Express, in *Mars Express: The Scientific Payload*, A. Wilson, Ed. (ESA Special Publication SP-1240), 121, (2004).
- Barth, C.A., C.W. Hord, J.B. Pearce, K.K. Kelly, G.P. Anderson, and A.I. Stewart, Mariner 6 and 7 ultraviolet spectrometer experiment: Upper atmosphere data, *J. Geophys. Res.*, 76, 2213, (1971).
- Barth, C.A., The atmosphere of Mars, *Annu. Rev. Earth Pl. Sc.*, 2, 333, (1974).
- Barth, C.A., C.W. Hord, A.I.F. Stewart, W.R. Pryor, K.E. Simmons, W.E. McClintock, J.M. Ajello, K.L. Naviaux, and J.J. Aiello, Galileo ultraviolet spectrometer observations of atomic hydrogen in the atmosphere of ganymede, *Geophysical Research Letters* 24, no. 17, 2147, (1997).
- Beghin, C., La Physique des Plasmas Spatiaux et l'expérience PICPAB à bord du Spacelab, *L'Astronomie*, 98, 273 (1984).

- Berthelier, J.-J., J.M. Illiano, R.R. Hodges, J. Covinhes, M. Godefroy, G. Gogly, J. Guillou F. Le Golf, F. Leblanc, Z. Racic, P. Rouchette, D. Krankowsky, D. Dorflinger, O. Vaisberg, V. Smimov, N. Kolesova, The Dymio Ion Mass Spectrometer of the Mars 96 Mission, *Measurement Techniques in Space Plasmas: Particles Geophysical Monograph* 102, (1998).
- Bonard, J.M., Hannes Kind, Thomas Stöcklic, Lars-Ola Nilssona. Field emission from carbon nanotubes : the first five years. *Solid-State Electronics*, 45, 893, (2001).
- Broadfoot, A. L., D. E. Shemansky, and S. Kumar, Mariner 10–Mercury’s atmosphere, *Geophys. Res. Lett.*, 3, 577, (1976).
- Broadfoot, A. L., S. S. Clapp, and F. E. Stuart, Mariner 10 ultraviolet spectrometer - Airglow experiment, *Space Science Instrumentation*, 3, 199, (1977a).
- Broadfoot, A. L., S. S. Clapp, and F. E. Stuart, Mariner 10 ultraviolet spectrometer - Occultation experiment, *Space Science Instrumentation*, 3, 209, (1977b).
- Cambou, F., R.Z. Sagdeev and I.A. Zhulin, The ARAKS project, *Space Science Instrumentation*, 4, 117 (1978).
- Carlson, C. W., D. W. Curtis, G. Paschmann, and W. Michael, An Instrument for Rapidly Measuring Plasma Distribution Functions with High Resolution, *Adv. Space Res.*, 2, 67-70, (1983)
- Carr, M.H., Retention of an atmosphere on early Mars, *Journal of geophysical research*, 104, E9, 21,897–21,909, (1999).
- Chamberlain, J.W., Planetary coronae and atmospheric evaporation, *Planet. Space Sci.*, 11, 901, (1963).
- Chassefière, E., Leblanc, F. Methane release and the carbon cycle on Mars, *Planet. Space Sci.*, 59, 207, (2011).
- Chaufray, J.Y Bertaux J.L., Leblanc F., and E. Quémerais, Observation of the hydrogen corona with SPICAM on Mars Express, *Icarus*, 195, 2, 598, (2008).
- Chaufray, J. Y., F. Leblanc, E. Quémerais, J. L. Bertaux, Martian oxygen density at the exobase deduced from O I 130.4-nm observations by Spectroscopy for the Investigation of the Characteristics of the Atmosphere of Mars on Mars Express, *Journal of Geophysical Research: Planets*, 114, E2, (2009).
- Chhowalla, M., K. B. K. Teo, C. Ducati, N. L. Rupesinghe, G. A. J. Amaratunga, A. C. Ferrari, D. Roy, J. Robertson, and W. I. Milne. The influence of the arrangement and spacing of CNT column array on the characteristic of field emission. *J. Appl. Phys.* 90, 5308 (2001).
- Cipriani, F., Thèse de doctorat, « La couronne neutre suprathermique de Mars : Modélisation et étude d’une instrumentation pour sa mesure in-situ ». Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines, (2006).
- Cipriani, F., F. Leblanc, and J.J. Berthelier, Martian corona: non thermal sources of hot heavy species, *J. Geophys. Res.*, (2007).
- Cravens, T. E., J. U. Kozyra, A. F. Nagy, T. I. Gombosi, and M. Kurtz, Electron impact ionization in the vicinity of comets, *J. Geophys. Res.*, 92, 7341, (1987).
- Dahl, D.A, SIMION for the personal computer in reflection *International Journal of Mass Spectrometry*, 200, 1–3, 3, (2000).
- Delcourt, D., Y. Saito, J.-M. Illiano, N. Krupp, J.-J. Berthelier, D. Fontaine, M. Fraenz, F. Leblanc, H. Fischer, S. Yokota, H. Michalik, M. Godefroy, E. Saint-Jacques, J.-D. Techer, B. Fiethe, J. Covinhes, J. Gastou, D. Attia, The mass spectrum analyzer (MSA) onboard BEPI COLOMBO MMO: Scientific objectives and prototype results, *Advances in Space Research* 43 869, (2009).

- Denisov, E., E. Damoc, O. Lange and A. Makarov, Orbitrap pectrometry with resolving power above 1,000,000. *International Journal of Mass Spectrometry*, 325-327, 80, (2012).
- Devoto, P., Thèse de doctorat, « Conception et réalisation d'un spectromètre de masse à temps de vol spatialisable de type «réflectron» : électronique et tête de mesure. », Université de Toulouse III, (2006).
- El-Kareh, A. B. and J. C. J. El-Kareh, Chapter VI "The Electrostatic Unipotential Lens," *Electron Beams, Lenses and Optics*, Vol. 1, Academic Press, New York, 186, (1970).
- Feldman, P. D., E.B. Burgh, S.T. Durrance, and A.F. Davidsen, Far-ultraviolet spectroscopy of Venus and Mars at 4A resolution with the Hopkins Ultraviolet Telescope on Astro-2, *Astrophys. J.*, 538, 395, (2000).
- Feldman, P. D., A. J. Steffl, J.I Wm. Parker, M. F. A'Hearn, J.L. Bertaux, S. A. Stern, H. A. Weaver, D. C. Slater, M. Versteeg, H. B. Throop, N. J. Cunningham, L. M. Feaga, ROSETTA-Alice observations of exospheric hydrogen and oxygen on Mars, *Icarus*, 214, 2, 394, (2011).
- Fox, J. L., and A. B. Hac, Photochemical escape of oxygen from Mars: A comparison of the exobase approximation to a Monte Carlo method, *Icarus*, 204, 527, (2009).
- Fraser, G.W., J.F. Pearson, J.E. Lees Dark noise in microchannel plate X-ray detectors *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 254, 2, 447, (1987).
- Gamow, G., Quantum theory of the atomic nucleus, *Z. Phys.*, 51, 204, (1928).
- Gröning, O., O. M. Küttel, Ch. Emmenegger, P. Gröning, and L. Schlapbach, Field emission properties of carbon nanotubes. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 18, 665 (2000).
- Hall, D.T., P.D. Feldman, M.A. McGrath, and D.F. Strobel, The far ultraviolet oxygen airglow of europa and ganymede, *The Astrophysical Journal*, 499, 475, (1998).
- Hu, Q., R.J. Noll, H. Li, A. Makarov, M. Hardman and G. Cooks, The Orbitrap : a new mass spectrometer, *J. Mass Spectrom.*, 40, 430, (2005).
- Hunten, D. M., T. H. Morgan, and D. E. Shemansky, "The Mercury Atmosphere" in *Mercury*, eds. F. Vilas, C. R. Chapman and M. S. Matthews, University of Arizona Press, pp. 562, (1988).
- Jakosky, B.M., R.O. Pepin, R.E. Johnson, and J.L. Fox, Mars atmospheric loss and Isotopic fractionation by solar-wind-induced sputtering and photochemical escape, *Icarus*, 111, 271, (1994).
- Jeans, J.H. (1916), *The dynamical theory of gases*, 4 th edition, Dover, New York, (1954).
- Johnson, R. E., M. Liu, and C. Tully, Collisional dissociation cross section for O+O₂, CO and N₂, O₂+O₂, N+N₂, and N₂+N₂. *Planetary and Space Science*, 50, 123, (2002).
- Jung, B. C., S. Lee , H. J. Yoon, S. S. Yang, and K. H. Koh, Fabrication and operation triode electron emitters as ion source for miniature mass spectrometer, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 26, 689 (2008).
- Kella, J., P.J. Johnson, H.B. Pederson, L. Vejby-Christensen, and L.H. Andersen, The source of green light emission determined from a heavy-ion storage ring experiment, *Science*, 276, 1530, (1997).
- Khurana, K. K., R. T. Pappalardo, N. Murphy, and T. Denk, The origin of ganymede's polar caps, *Icarus* 191, 193, (2007).
- Kim, J., A. F. Nagy, J. L. Fox, and T. E. Cravens, Solar cycle variability of hot oxygen atoms at Mars. *J. Geophys. Res.*, 103(12), 29339, (1998).
- Kliore, A., D.L. Cain, G.S. Levy, Von R. Eshleman, G. Fjeldbo, and F.D. Drake, Occultation experiment: Results of the first direct measurement of Mars's atmosphere and ionosphere, *Science*, 149, 1243, (1965).

- Krasnopolsky, V.A., Mars' upper atmosphere and ionosphere at low, medium and high solar activities: Implications for evolution of water, *J. Geophys. Res.*, 107, 5128, (2002).
- Krishnakumar, E., S.K. Srivastava, Cross-sections for electron impact ionization of O₂, *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*, 113, 1, 1, (1992).
- Leblanc, F., and R.E. Johnson, Role of molecules in pick-up ion sputtering of the Martian atmosphere, *J. Geophys. Res.*, 107, (2002).
- Leblanc, F., E. Chassefière, R.E. Johnson, D.M. Hunten, E. Kallio, D.C. Delcourt, R.M. Killen, J.G. Luhmann, A.E. Potter, A. Jambon, G. Cremonese, M. Mendillo, N. Yan and A.L. Sprague, Mercury's exosphere origins and relations to its magnetosphere and surface, *Planetary Space Science*, 55, 1069, (2007).
- Leblanc, F., and R. E. Johnson, Mercury's sodium exosphere, *Icarus*, 164, 261-281, (2003).
- Le Sech, N., Thèse de doctorat, « Photocathodes à base de nanotubes de carbone sur substrats semi-conducteurs de type III-V ». Application aux amplificateurs hyperfréquence, Ecole Polytechnique (2010).
- Luhmann, J.G., R.E. Johnson, and M.H.G. Zhang, Evolutionary impact of sputtering of the Martian atmosphere by O⁺ pick-up ions, *Geophys. Res. Lett.*, 19, 2151, (1992).
- Mamyrin, B.A., V.J. Karatajev, D.V. Shmikk, and V.A. Zagulin, *Sov. Phys. JETP*, 37, 45-48 (1973).
- March, R. E., An introduction to Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry, *J. Mass Spectrom.*, 32, 351, (1997).
- Marconi, M.L., A kinetic model of ganymede's atmosphere, *Icarus* 190, 155, (2007).
- Mattauch, J., and Herzog, R., Über einen neuen Massenspektrographen *Z. Physik*, 89, 786, (1934).
- McClintock, W., T. Bradley, R. Vervack Jr., R. Killen, A. Sprague, N. Izenberg, S. Solomon, Mercury's Exosphere: Observations During MESSENGER's First Mercury Flyby, *Science*, 321, 92, (2008).
- McComas, D.J., H.O. Funsten, E.E. Scime, Advanced in Low Energy Neutral Atom Imaging, in *Measurement Techn. In Space Plasmas Fields*, Geoph. Monograph Ser, 103, edited by R.F. Pfaff, J.E. Borovsky, D.T. Young, 275, (1998).
- McComas, D.J. and J.E. Nordholt, A new approach to 3D high sensitivity high mass resolution space plasma composition measurements *Rev. Sci. Instrum.* 61, 3095, (1990).
- McDowell, C.A., *Mass Spectrometry*, McGraw Hill Book Company, (1963).
- Milillo, A., P. Wurz, S. Orsini, D. Delcourt, E. Kallio, R. M. Killen, H. Lammer, S. Massetti, A. Mura, S. Barabash, G. Cremonese, I. A. Daglis, E. De Angelis, A. M. Di Lellis, S. Livì, V. Mangano, K. Torkar, Surface-exosphere-magnetosphere system of mercury, *Space Science Reviews*, 117, 397, (2005).
- Möbius, E., L.M. Kistler, M.A. Popecki, K.N. Crocker, M. Granoff, Y. Jiang, E. Sartori, V. Ye, H. Rme, J.A. Sauvaud, A. Cros, C. Aoustin, T. Camus, J.-L. Mdale, J. Rouzaud, C.W. Carlson, J.P. McFadden, D. Curtis, H. Heetericks, J. Croyle, C. Ingraham, B. Klecker, D. Hovestadt, M. Ertl, F. Eberl, H. Ktle TM, E. Ktineth, P. Laeverenz, E. Seidenschwang, E.G. Shelley, D.M. Klumpar, E. Hertzberg, G.K. Parks, M. McCarthy, A. Korth H. Rosenbauer, B. Grive L. Eliasson, S. Olsen, H. Balsiger, U. Schwab and M. Steinacher, The 3-D Plasma Distribution Function Analyzers With Time-of-Flight Mass Discrimination for Cluster, FAST, and Equator-S, *Measurement Techniques in Space Plasmas: Particles Geophysical Monograph* 102, (1998).
- Morgan, T. H., H. A. Zook, and A. E. Potter, Impact-driven supply of sodium and potassium to the atmosphere of Mercury, *Icarus*, 75, 156, (1988).

- Murphy, E. L., R.H. Good, Thermionic Emission, Field Emission, and the Transition Region, *Phys. Rev.*, 102, 1464, (1956).
- Nguyen, T. H., K. H. Koh, S. Lee, P. N. Minh, N. T. T. Tam and P. H. Khoi, Comparison of field-electron emission from different carbon nanotube array structures, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 27, 749 (2009).
- Nier, A.O., A mass spectrometer for routine isotope abundance measurements, *Rev. Sci. Instrum*, 11, 212, (1940).
- Nier, A.O., M.B. McElroy, Composition of the Mars' upper atmosphere – Results from neutral mass spectrometers on Viking 1 and 2, *J. Geophys. Res.*, 82, 4341, (1977).
- Nordholt, J.E. et al., The CASSINI Ion Mass Spectrometer : Performance Metrics and Techniques, in *Measurement Techniques in Space Plasma, Particles*, AGU Geophys. Monograph 102, ed by R.F. Pfaff, J.E. Borovsky and D.T. Young, 209, (1998).
- Olsen, R.C. Modification of Spacecraft Potentials by thermal Electron Emission on ATS-5. *Journal of spacecraft and rockets*, 18, 527 (1981).
- Orsini, S., S. Livi, K. Torkar, S. Barabash, A. Milillo, P. Wurz, A.M. Di Lellis, E. Kallio, the SERENA team, SERENA: A suite of four instruments (ELENA, STROFIO, PICAM and MIPA) on board BepiColombo-MPO for particle detection in the Hermean environment, *Planetary and Space Science* 58, 166, (2010).
- Orton, G.S., J.R. Spencer, L.D. Travis, T.Z. Martin, and L.K. Tamppari, Galileo photopolarimeter-radiometer observations of jupiter and the galilean satellites, *Science* 274, 389, (1996).
- Owen, T., The composition and surface pressure of the Martian atmosphere: Results from the 1965 opposition, *Astrophys. J.*, 146, 257, (1966).
- Patterson, M. J., M. T. Domonkos, J. E. Foster, T. W. Haag, M. A. Manteniaks, L. R. Pinero, V. K. Rawlin, G. C. Soulas, and J. S. Sovey, Ion propulsion development activities at NASA Glenn Research Center, AIAA paper, 3810, (2000).
- Paul, W., Electromagnetic traps for charged and neutral particles, *Reviews of modern physics*, 62, (1990).
- Peverall, R., S. Rosen, R.R. Peterson, M. Larsson, A. Al-Khalili, L. Viktor, J. Semaniak, R. Bobbenkamp, A.N. Le Padellec, and W.J. Van der Zande, Dissociative recombination and excitation of O_2^+ : Cross sections, products yields, and implications for studies of ionospheric airglows, *J. Chem. Phys.*, 114, 6679, (2001).
- Potter, A., and T. Morgan, Discovery of sodium in the atmosphere of Mercury, *Science*, 229, 651, (1985).
- Potter, A. E., and T. H. Morgan, Potassium in the atmosphere of Mercury, *Icarus*, 67, 336, (1986).
- Rosen, S., R. Peverall, M. Larsson, and. co authors, Absolute cross sections and final-state distributions for dissociative recombination and excitation of CO^+ , using an ion storage ring. *Phys.Review A*, 57, 4462, (1998).
- Sastry, K., D. Goldberg, G. Kendall, *Genetic Algorithms, Search Methodologies*, 97, (2005).
- Schläppi, B., K. Altwegg, H. Balsiger, M. Hässig, A. Jäckel, P. Wurz, B. Fiethe, M. Rubin, S. A. Fuselier, J. J. Berthelier, J. De Keyser, H. Rème, and U. Mall, Influence of spacecraft outgassing on the exploration of tenuous atmospheres with in situ mass spectrometry, *Journal of geophysical research*, 115, A12313, (2010).
- Shematovich, V.I., R.E. Johnson, J.F. Cooper, and M.C. Wong, Surface-bounded atmosphere of europa, *Icarus* 173, 480, (2005).

- Shirai, T., T. Tabata, H. Tawara, Analytic cross sections for selection collisions with CO, CO₂ and H₂O relevant to edge plasma impurities, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 79, 143 (2001).
- Solomon, S. C, R. L McNutt Jr., R. E Gold, M. H Acuña, D. N Baker, W. V Boynton, C. R Chapman, A. F Cheng, G. Gloeckler, J. W Head III, S. M Krimigis, W. E McClintock, S. L Murchie, S. J Peale, R. J Phillips, M. S Robinson, J. A Slavin, D. E Smith, R. G Strom, J. I Trombka, M. T Zuber, The MESSENGER mission to Mercury: scientific objectives and implementation, *Planetary and Space Science*, 49, 14–15, 1445, (2001).
- Sourd, B., thèse de doctorat : « Contribution à l'étude de la réactivité de surface : réalisation d'un spectromètre de masse à temps de vol et détermination des coefficients de transport. » Université de Limoges. (2007).
- Spindt, C.A., I. Brodie, L. Humphrey and E. R. Westerberg, Physical properties of thin-film field emission cathodes with molybdenum cones *J. Appl. Phys.* 47 ,5248 (1976).
- Stern, S. A. , The lunar atmosphere : history, status, current problems, and context, *Reviews of Geophysics*, 37, 4 , 453, (1999).
- Torkar, K., Tajmar M., Escoubet C.P. and Svenes K., Active Spacecraft Potential Control for the Magnetospheric Multiscale Mission. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 40, 394 (2012).
- Turc, L., L. Leclercq, F. Leblanc, R. Modolo, J.Y. Chaufray, Modelling Ganymede's neutral environment: A 3D parallel test-particle simulation, *Icarus*, Sous presse (2013).
- Vaisberg, O. L., DI-Aries Panoramic Energy–Mass Spectrometer of Ions for the Phobos-Grunt Project, *Solar System Research*, Vol. 44 Issue 5, 456, (2010).
- Waite, J. H. Jr., W. S. Lewis, W. T. Kasprzak, V. G. Anicich, B. P. Block, T. E. Cravens, G. G. Fletcher, W.-H. Ip, J. G. Luhmann, R. L. McNutt, H. B. Niemann, J. K. Parejko, J. E. Richards, R. L. Thorpe, E. M. Walter, R. V. Yelle, The Cassini Ion and Neutral Mass Spectrometer (INMS) Investigation, *Space Science Reviews*, 114, 1-4, 113, (2004).
- Wiley, W.C., McLaren I.H., Time of flight mass spectrometer with improved resolution, *Rev. Sci. Instrum.*, 26, 1150, (1955).
- Wright, I.P., Barber S.J., Morgan G.H., Morse, A.D., Sheridan S., Andrews D.J., Yau D., Evans S.T., Leese M.R., Zarnecki J.C., Kent B.J., Waltham N.R., Whalley M.S., Heys S., Drummond D.L., Edson R.L., Sawyer E.C., Turner R.F. and Pillinger. Ptolemy – an Instrument to Measure Stable Isotopic Ratios of Key Volatiles on a Cometary Nucleus. *Space Science Reviews*, 128, 363 (2007).
- Wurz, P. and H. Lammer, Monte-Carlo simulation of Mercury's exosphere, *Icarus*, 164, 1, (2003).
- Wurz, P., D. Abplanalp, M. Tulej and H. Lammer, A neutral gas mass spectrometer for the investigation of lunar volatiles, *Planetary and Space Science*, 74, 1, 264, (2012).
- Yagi, M., F. Leblanc, J.Y. Chaufray, F. Gonzalez-Galindo, S. Hess, R. Modolo, Mars exospheric thermal and non-thermal components: Seasonal and local variations, *Icarus*, 221, 2, 682, (2012).
- Yakshinskiy, B. V. and T. E. Madey, Photon-stimulated desorption as a substantial source of sodium in the lunar atmosphere, *Nature*, 400, 642, (1999).
- Yasushi, O, K. Hashimoto, S. Kitamura, K. Matsumoto and S. Kawamoto. 11th Spacecraft Charging Technology Conference (2010).
- Zurbuchen, T.H., Raines J., Gloeckler G., Krimigis S., Slavin J., Koehn P., Killen R., Sprague A., McNutt R., Solomon S., MESSENGER Observations of the Composition of Mercury's Ionized Exosphere and Plasma Environment, *Science*, 321, 5885, 90, (2008).