



**HAL**  
open science

# Modélisation multiphysique de l'émission électronique par effet de champ d'une cathode micro/nano-structurée en 3D

Darius Mofakhami

► **To cite this version:**

Darius Mofakhami. Modélisation multiphysique de l'émission électronique par effet de champ d'une cathode micro/nano-structurée en 3D. Energie électrique. Université Paris-Saclay, 2022. Français. NNT: 2022UPAST029 . tel-03700912

**HAL Id: tel-03700912**

**<https://theses.hal.science/tel-03700912v1>**

Submitted on 21 Jun 2022

**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.

# Modélisation multiphysique de l'émission électronique par effet de champ d'une cathode micro/nano-structurée en 3D

*Multiphysics 3D modelling of the field electron emission from a  
micro/nano-structured cathode*

**Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay**

École doctorale n° 575 : electrical, optical, bio : physics and engineering (EOBE)

Spécialité de doctorat : Génie électrique

Graduate School : Sciences de l'ingénierie et des systèmes

Référent : CentraleSupélec

Thèse préparée dans les unités de recherche du Laboratoire de Génie Electrique et Electronique de Paris (Université Paris-Saclay, CentraleSupélec, CNRS) et du Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas (Université Paris-Saclay, CNRS) sous la direction de Philippe DESSANTE, Professeur, le co-encadrement de Tiberiu MINEA, Professeur, le co-encadrement de Philippe TESTE, Chargé de recherche, et le co-encadrement de Romaric LANDFRIED, Maître de conférence

**Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 7 mars 2022, par**

**Darius Mofakhami**

## Composition du jury

<b>Olivier Lesaint</b> Directeur de recherche, G2ELab, Grenoble Alpes	Président
<b>Anthony Ayari</b> Directeur de recherche, iLM, Lyon 1	Rapporteur
<b>Bruno Lepetit</b> Chargé de recherche, LCAR, Toulouse III	Rapporteur
<b>Angella Vella</b> Professeure, GPM, Rouen	Examinatrice
<b>Thomas Antoni</b> Maître de conférence, CentraleSupélec	Examineur
<b>Philippe Dessante</b> Professeur, GeePs, CentraleSupélec	Directeur de thèse



À ces trains de la ligne B du RER,  
Stoïques compagnons de mes études passées.  
De Bourg-La-Reine à Cité Universitaire,  
Saint-Michel ou Luxembourg, et jusqu'à Orsay.



# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>v</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Développement du cadre théorique et état de l'art technologique de l'émission électronique par effet de champ</b>	<b>9</b>
1.1 Établissement d'un cadre théorique	9
1.2 Développements technologiques autour de l'émission électronique	14
1.2.1 Sources d'électrons dans les tubes électroniques	14
1.2.2 Microscope à émission de champ	16
1.2.3 Succès et limites des émetteurs de type Müller	18
1.2.4 Développement des réseaux d'émetteurs à effet de champ	19
1.3 Émission électronique par effet de champ et claquage électrique sous vide	21
<b>2 Modèle d'émission électronique par effet de champ thermo-assistée et algorithme de résolution numérique</b>	<b>31</b>
2.1 Essence du problème multiphysique	32
2.2 Modèle d'émission électronique utilisé	34
2.2.1 Théorie de Sommerfeld	34
2.2.2 Énergie normale, contribution au courant et fonction d'apport ( <i>supply function</i> )	37
2.2.3 Interface cathode-vide et coefficient de transmission	38
2.2.4 Calcul numérique de la densité de courant	42
2.2.5 Distribution énergétique des électrons émis	44
2.2.6 Bilan d'énergie des électrons et effet Nottingham	45
2.2.7 Température d'inversion Nottingham	47
2.3 Résolution sous COMSOL et géométrie des aspérités	49
2.3.1 Domaine de simulation et géométrie	49
2.3.2 Équations physiques et conditions aux limites	52
2.3.3 Maillage et puissance de calcul	56
2.4 Perspectives d'amélioration du modèle	58
2.4.1 Au-delà de la théorie de Sommerfeld	58
2.4.2 Meilleure modélisation de l'interface métal/vide	59
2.4.3 Au-delà de l'approximation BKW	64
2.4.4 Variation du travail de sortie et forme des émetteurs/aspérités	64
2.5 Conclusion	66
<b>3 Émetteur unique : Autoéchauffement, emballement résistif et bistabilité d'inversion Nottingham</b>	<b>71</b>
3.1 Autoéchauffement et émission de champ thermoassistée	73
3.1.1 Évolution vers l'équilibre	73
3.1.2 Destruction thermique	78
3.1.3 Transition vers l'émission thermoassistée en régime permanent	79
3.1.4 Caractéristiques de l'émission au champ de préclaquage	82

3.2	Emballement résistif et bistabilité d'inversion Nottingham	85
3.2.1	Transition discontinue entre deux états stationnaires	85
3.2.2	Emballement transitoire au cours de l'autoéchauffement	88
3.2.3	Influence des paramètres de l'émetteur	94
3.2.4	Discussion sur les conditions de la bistabilité	98
3.3	Conclusion	101
<b>4</b>	<b>Assemblées d'émetteurs proches : Ecrantage électrostatique, espacement optimal et couplage thermique</b>	<b>105</b>
4.1	Interaction électrostatique entre émetteurs à proximité	107
4.1.1	Loi d'écrantage électrostatique avec la distance	107
4.1.2	Recherche de l'espacement optimal dans les réseaux	108
4.1.3	Implications de l'auto échauffement dans la recherche d'un espacement optimal	111
4.2	Autoéchauffement en 3D et couplage thermique	114
4.2.1	Phénoménologie du couplage thermique	114
4.2.2	Analyse paramétrique du couplage thermique	116
4.2.3	Amplitude du couplage thermique en conditions expérimentales	120
4.3	Conclusion	122
<b>5</b>	<b>Simplification 3D vers <math>N \times 2D</math> pour la modélisation d'une assemblée d'émetteurs proches</b>	<b>125</b>
5.1	Ecrantage et dissymétrie	126
5.1.1	Faible dissymétrie et moyenne orthoradiale de la distribution en champ	126
5.1.2	Erreur en cas de forte dissymétrie	129
5.2	Méthode de réduction 3D vers $N \times 2D$	131
5.2.1	Détail mathématique	132
5.2.2	Application en forte dissymétrie	133
5.2.3	Intégration de la simplification 3D vers $N \times 2D$ dans notre algorithme de simulation	133
5.3	Performance pour l'auto-échauffement d'un réseau d'émetteurs sphère-sur-cône	136
5.4	Conclusion	139
<b>6</b>	<b>Application aux sources d'électrons : émission de champ depuis un réseau de nanostructures de carbone</b>	<b>141</b>
6.1	Source Thales, statistique de croissance et modèle	142
6.2	Autoéchauffement d'un émetteur typique	145
6.3	Effet de la statistique de croissance sur la performance de l'émission	152
6.3.1	Statistique de croissance et échantillonnage	152
6.3.2	Accroissement de la dispersion avec la densification du réseau	154
6.3.3	Intérêt de la reproductibilité des émetteurs	160
6.4	Conclusion	162
	<b>Conclusion générale</b>	<b>167</b>
<b>A</b>	<b>Détails sur la théorie de Sommerfeld</b>	<b>171</b>
<b>B</b>	<b>Expression de la densité de courant émis et calcul de la fonction d'apport</b>	<b>175</b>
<b>C</b>	<b>Méthode des charges images</b>	<b>179</b>
<b>D</b>	<b>Détail du calcul du coefficient de transmission</b>	<b>181</b>
<b>E</b>	<b>Comparaison de la densité de courant avec les formules analytiques usuelles et représentation de Fowler-Nordheim</b>	<b>189</b>
<b>F</b>	<b>Détail du calcul établissant la forme de distribution en énergie totale des électrons émis</b>	<b>197</b>
<b>G</b>	<b>Influence du maillage en 3D sur la précision des simulations</b>	<b>201</b>

<b>H Propriétés matériaux</b>	<b>205</b>
<b>I Calcul de <math>F_{2D}</math> par la fonction <math>\mathcal{W}</math> de Lambert</b>	<b>209</b>
<b>Symboles et abréviation</b>	<b>211</b>
<b>Remerciements</b>	<b>215</b>





# Introduction générale

« Dans la vie, rien n'est à craindre, tout est à comprendre... »

---

Marie Curie  
(Our Precarious Habitat, M. Benarde – 1973)

L'objet de cette thèse est l'étude fondamentale de l'émission électronique sous vide par effet de champ depuis des micro/nanostructures métalliques ou semi-conductrices. Plus précisément, l'accent sera mis sur l'analyse temporelle des mécanismes d'échauffement qui ont lieu au cours de l'émission électronique de ces structures. L'émission par effet de champ est un moyen d'extraire des électrons d'un matériau conducteur par effet tunnel en plongeant ce matériau dans un champ électrique intense. Ce phénomène est à distinguer des deux autres mécanismes d'émission habituel : l'émission photo-électrique et l'émission thermoïonique.

## Présentation du phénomène physique

En se plaçant dans le cadre de la théorie de Sommerfeld, on peut décrire les électrons de conduction comme un gaz parfait piégé dans une cuvette de potentiel simulant la force d'attraction subie à l'interface métal-vide par un électron témoin. À température ambiante, l'énergie thermique maximale des électrons peut être prise pratiquement égale au niveau de fermi  $\epsilon_F$ . L'énergie manquante pour qu'un électron ayant cette énergie puisse sortir du puits de potentiel est le travail de sortie  $\phi$ . La figure 1 schématise dans ce formalisme les trois mécanismes d'émission électronique.

Le principe de base de l'émission photo-électrique est d'apporter l'énergie manquante aux électrons par le biais d'un rayonnement électromagnétique à la bonne fréquence. L'énergie ainsi transférée aux électrons leur permet de passer au-dessus la barrière de potentiel. Dans le cas de l'émission thermoïonique, c'est l'augmentation de l'agitation thermique qui permet à une petite portion des électrons d'acquérir suffisamment d'énergie pour sortir de la cuvette. On formalise généralement ce mécanisme par le biais de la fonction d'apport – ou *supply function* en anglais – qui donne la variation avec la température de la densité de flux d'électrons arrivant à l'interface métal vide à une énergie cinétique normale donnée. Enfin, le troisième mécanisme est l'émission par effet de champ. En appliquant un fort champ électrique à la surface du métal, on modifie la forme de la barrière de potentiel. Pour un champ constant, la barrière de potentiel devient triangulaire au premier ordre. Si le champ est suffisamment intense (de l'ordre du GV/m), l'épaisseur de la barrière perçue par les électrons incidents à une énergie normale autour du niveau de Fermi peut atteindre le nanomètre. La probabilité de passage par effet tunnel devient alors suffisamment grande pour permettre l'extraction d'un courant.

Pour obtenir une extraction notable, il faut cependant que le champ soit supérieur à quelques gigavolts par mètre alors que les champs électriques des dispositifs ultra haute-tension modernes ne dépassent que rarement la centaine de mégavolts par mètre ( $0.1 \text{ GV/m}$ ) en configuration DC. Pourtant, l'émission électronique par effet de champ a été envisagée pour la fabrication de source à rayon X dès le début du 20e siècle [1] et a depuis aussi été mise en cause dans des mécanismes de claquage

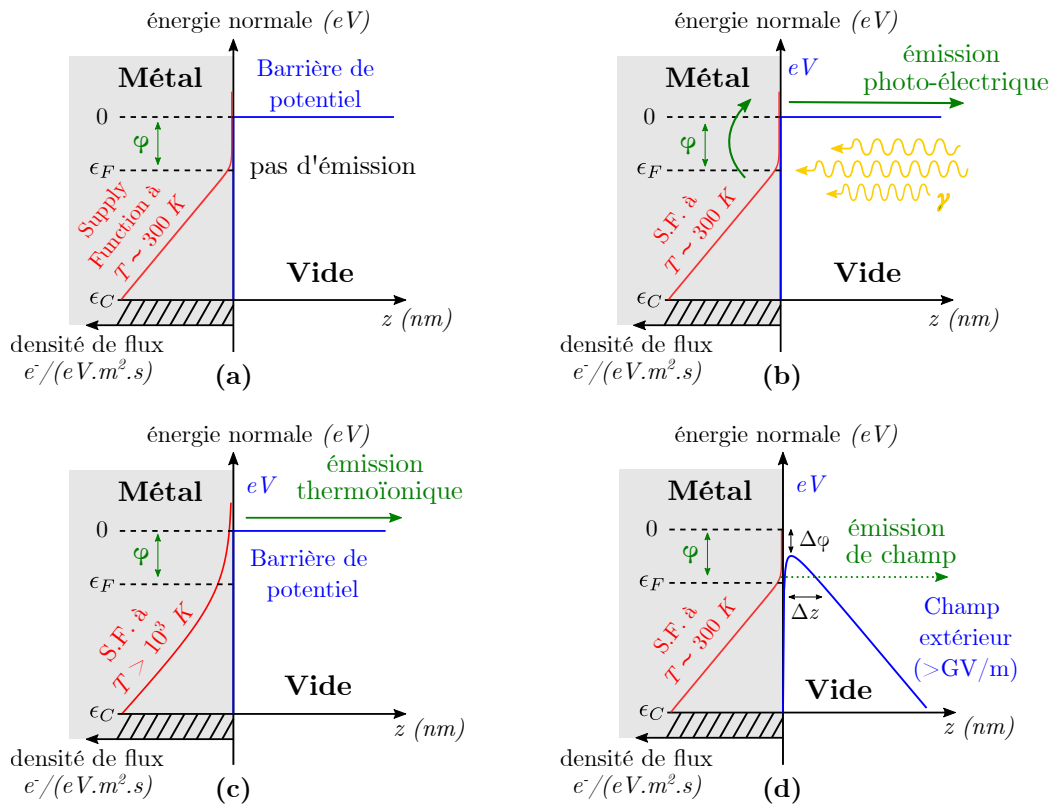


FIGURE 1 – Schémas des différents mécanismes élémentaires d'émission dans le cadre de la théorie de Sommerfeld. **(a)** : absence d'émission à température ambiante et en l'absence de champ et de rayonnement. **(b)** : émission photo-électrique. **(c)** : émission thermoïonique. **(d)** : émission de champ.

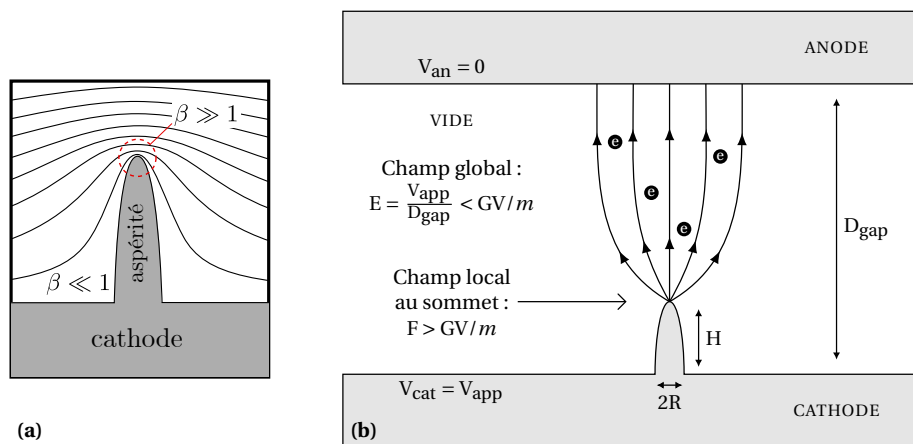


FIGURE 2 – Émission par effet de champ induite par le renforcement géométrique du champ électrique au sommet d'une pointe. **(a)** : Au sommet de la pointe, la compression des isopotentiels (courbes noires) mène à un fort facteur de renforcement de champ  $\beta \gg 1$ . À la base de la pointe, l'écartement des isopotentiels réduit le champ électrique ( $\beta \ll 1$ ). **(b)** : Le renforcement du champ local  $F$  par effet de pointe peut permettre l'émission d'électron avec un champ global  $E$  inférieur au gigavolt par mètre.

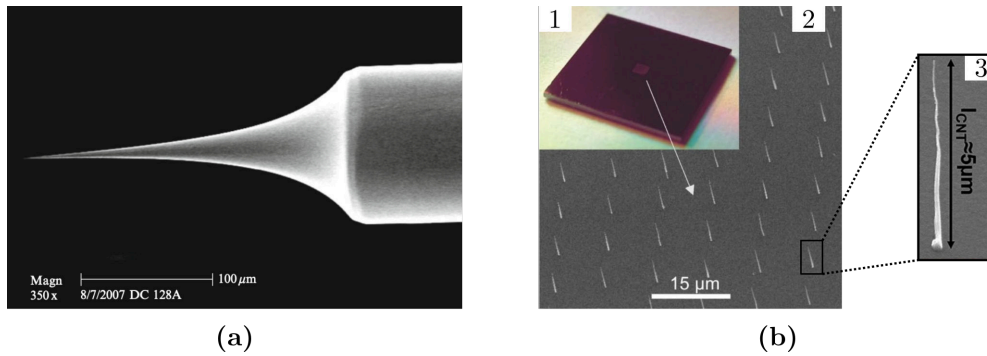


FIGURE 3 – (a) : Micrographie d'une pointe en tungstène obtenue par gravure électrolytique utilisée comme source d'électron par effet de champ pour des microscopes électroniques. Le rayon au sommet est de l'ordre de la centaine de nanomètres. (b) : Source d'électrons développé par Thales, basé sur l'émission par effet de champ depuis un réseau régulier de nanostructure de carbone. **1** : Photographie de la puce (1 cm par 1 cm) gravée sur une surface centrale de 1 mm<sup>2</sup>. **2** : Image au microscope électronique à balayage du réseau d'émetteur. **3** : Zoom sur un émetteur typique. Le rayon au sommet est de quelques dizaines de nanomètres.

électrique sous vide [2, 3]. L'émission significative d'électrons par effet de champ dans ces cas est en fait permise par le renforcement de champ géométrique au sommet d'une pointe, comme schématisé sur la figure 2. Le facteur de renforcement de champ noté  $\beta$  est le rapport  $E/F$  entre champ global  $E$  (en l'absence de pointe) et champ local  $F$  (avec la pointe).

### Contexte et domaines d'intérêts

Dans le cadre de la conception de sources d'électrons, de tels pointes sont volontairement usinées à l'échelle micro/nanométrique pour obtenir un bon renforcement de champ sur une large surface. Meilleur est le renforcement, plus il sera aisé d'atteindre le champ d'allumage de la source. Plus la surface d'émission est large, meilleure sera l'intensité de la source. La figure 3 montre deux exemples très différents de source à effet de champ. La première est une pointe en tungstène obtenue par gravure électrolytique utilisée comme source d'électron pour des microscopes électroniques [4]. Sa hauteur d'une centaine de micromètres est quasiment mille fois plus grande que son rayon, de l'ordre d'une centaine de nanomètres. Cette géométrie permet aisément de gagner deux ordres de grandeur sur le champ électrique au sommet, mais limite en revanche le courant total du fait de la faible surface d'émission. Pour pallier l'antagonisme entre fort renforcement de champ et large surface d'émission, une possibilité est d'opérer en parallèle un grand nombre de pointes bien profilées. C'est la stratégie des réseaux d'émetteurs à effet de champ – FEA pour *Field Emitter Arrays* en anglais – employée dans le deuxième exemple : une source d'électron développée par Thales basée sur l'émission par effet de champ depuis un réseau régulier de nanostructures de carbone. En multipliant les sites émissifs sur une large surface, le gain en courant des FEA permet de concevoir des sources à effet de champ capables de remplacer les traditionnelles sources thermoïoniques pour des applications de production de rayon X [5] ou d'amplification d'ondes électromagnétiques dans les tubes électroniques [6].

Dans le cadre du claquage électrique sous vide, les pointes à l'origine de l'émission électronique sont en fait des aspérités de surface indésirables. La figure 4 montre comment une cathode insuffisamment polie peut naturellement présenter un grand nombre d'aspérités à sa surface. Des aspérités peuvent aussi apparaître à la suite d'un choc, d'une rayure ou même d'un précédent claquage, au niveau du pied de l'arc électrique. Enfin, des pointes nanométriques peuvent aussi émerger à la surface d'aspérités micrométriques préexistantes par électromigration avec l'application de champs particulièrement intenses (supérieurs à la dizaine de gigavolts par mètre), généralement des champs pulsés ou oscillants [8]. Si l'émission électronique peut dans ce cas perturber l'opération des dispositifs haute-tension, c'est en fait l'échauffement des aspérités qui pose un véritable problème. Cet échauf-

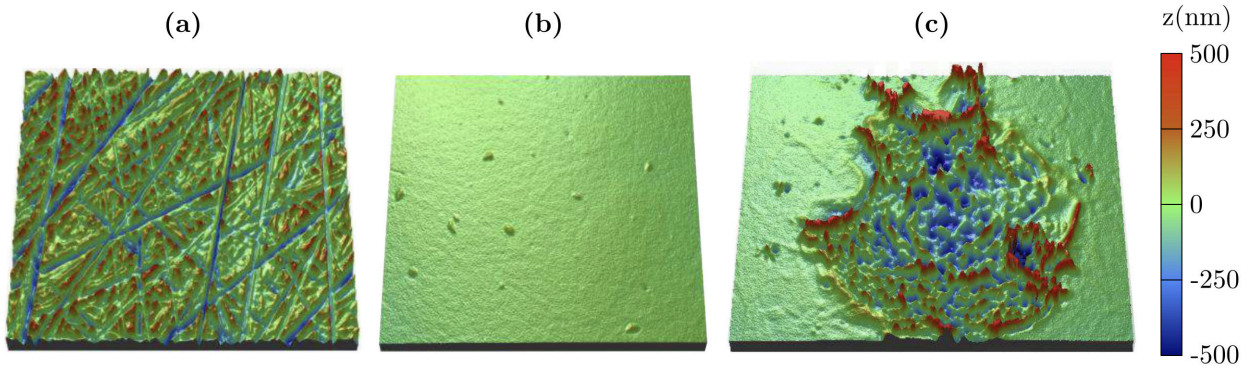


FIGURE 4 – Images au profilomètre 3D de l'état de surface d'une électrode en inox 316L après différents traitements. La surface scannée mesure  $124 \times 94 \mu\text{m}^2$ . **(a)** : Polissage au papier de silice jusqu'à une taille de grains de  $35 \mu\text{m}$ . **(b)** Polissage au papier de silice jusqu'à une taille de grains de  $15.3 \mu\text{m}$  suivi par un polissage au diamant avec une taille de particule de l'ordre du  $\mu\text{m}$ . **(c)** état de surface d'une électrode après claquage (court-circuit entre les électrodes). Les images proviennent de la thèse de K. Almaksour [7] (*in ref.* Fig. 67 et 87).

fement a deux origines. Une origine classique qui n'est autre que le chauffage résistif : l'effet Joule. Et une origine quantique reliée au bilan énergétique dans l'émetteur entre les électrons émis au sommet et les électrons en provenance de la cathode qui les remplacent : l'effet Nottingham. Ces deux mécanismes étant directement reliés à la circulation d'un courant induit par l'émission de champ, on regroupe généralement leurs effets combinés sous le terme d'*autoéchauffement* de l'émetteur. L'élévation locale de température qui en résulte peut provoquer un dégazage ou aller jusqu'à enclencher l'évaporation d'une partie de l'aspérité. Le gaz ainsi libéré risque d'être ionisé par les électrons présents et, par voie de conséquence, d'initier un arc électrique responsable du claquage.

Pour les sources d'électrons, l'autoéchauffement au cours de l'émission par effet de champ peut mener à la destruction thermique des émetteurs et causer une dégradation prématurée de la source. En fait, avec l'élévation de la température, la combinaison d'un apport d'électron à plus haute énergie et l'abaissement du sommet de la barrière de potentiel induite par le champ extérieur (abaissement Schottky  $\Delta\phi$  sur la figure 1d) intensifient l'émission qui entre alors en régime d'émission par effet de champ thermoassisté – ou émission *thermochamp* pour reprendre l'expression courante *thermo-field emission* en anglais. À partir de là, l'élévation de la température augmente la contribution thermique à l'émission qui augmente l'autoéchauffement. Cette boucle de rétroaction positive peut heureusement être contrebalancée par une dissipation suffisante de la chaleur vers la cathode et éventuellement le passage à un effet Nottingham refroidissant une fois le bilan énergétique entre électrons de remplacement et électrons émis devenu négatif. Ce dernier ingrédient (l'inversion de l'effet Nottingham) rend toutefois l'étude de l'autoéchauffement particulièrement complexe comme nous le verrons dans ce manuscrit.

### Objectifs et apports de la thèse

L'étude expérimentale de l'autoéchauffement des émetteurs et de leur destruction thermique, bien que riche [2, 9, 10, 11], n'offre qu'une mesure macroscopique des grandeurs mises en jeu. L'accès à une mesure fine des grandeurs locales nécessiterait une résolution spatiale de quelques dizaines de nanomètres et la possibilité de jongler de la microseconde à la nanoseconde. Par ailleurs, l'occurrence de claquages électriques endommagerait rapidement les dispositifs de mesures dont la précision va généralement de pair avec une grande fragilité.

C'est là qu'entre en jeu la modélisation numérique. L'autoéchauffement étant régi par les équations bien connues de la chaleur et de la conservation de la charge, il suffit d'y ajouter un modèle

d'émission électronique détaillé pour obtenir une description relativement complète du phénomène physique. La résolution numérique de ce modèle permet alors de déterminer les échelles de temps et d'espace pertinentes relatives à chaque grandeur, d'évaluer et comparer les amplitudes de ces grandeurs et ainsi de dégager les tendances générales qui peuvent expliquer les observations macroscopiques des expériences.

L'objectif de cette thèse est de s'appuyer sur un tel modèle d'émission électronique par effet de champ pour améliorer la compréhension fondamentale de l'autoéchauffement des émetteurs. L'idée est de mettre à profit la puissance d'une station de travail moderne aujourd'hui suffisante pour offrir une analyse temporelle détaillée de l'autoéchauffement et une résolution sur des géométries 3D, deux éléments jusqu'à récemment mis de côté.

### **Contexte de recherche**

Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre le laboratoire de Génie électrique et électronique de Paris et le laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas, deux laboratoires de l'université Paris-Saclay respectivement impliqués dans l'étude des claquages électriques et l'étude des sources de particules pour la thématique des dispositifs ultra haute-tension sous vide, comme les accélérateur de particules, les interrupteurs sous vide ou les machines à fusion type Tokamak. En parallèle, la fin de cette thèse s'est ouverte sur une voie de collaboration public-privé, avec une équipe du groupe Thales Recherche & Technologie qui développe depuis plus de dix ans une source d'électron basée sur l'émission par effet de champ depuis un réseau de nanostructure de carbone.

### **Structure du manuscrit**

Le chapitre 1 reprend de manière chronologique les étapes principales de la compréhension du phénomène d'émission par effet de champ jusqu'à l'établissement du paradigme théorique actuel. Dans un second temps, le chapitre donne une vision historique du développement des sources à effet de champ à travers les technologies clés qu'elles ont contribué à améliorer, voire rendues possibles. L'implication du phénomène dans les mécanismes de claquage est aussi passée en revue.

Le chapitre 2 présente l'algorithme numérique utilisé pour obtenir l'ensemble des résultats de cette thèse. Il détaille en profondeur les fondations théoriques de notre modèle d'émission électronique et discute ses hypothèses (certains développements théoriques sont placés en annexes). Il reprend aussi point par point la résolution multiphysique en géométrie 3D par la méthode des éléments finis.

Le chapitre 3 expose l'évolution temporelle de l'autoéchauffement et discute l'établissement d'un équilibre en régime permanent à travers une série de résultats obtenus pour un émetteur en géométrie 2D axisymétrique. Le chapitre aborde aussi le concept de tension de préclaquage et de destruction thermique des émetteurs et s'achève sur la mise en évidence d'un phénomène de bistabilité thermique jamais documentée jusqu'ici, lié à l'emballement du chauffage résistif et l'inversion de l'effet Nottingham.

Le chapitre 4 se concentre sur la modélisation en trois dimensions de plusieurs pointes émettant en parallèle. Par la prise en compte des effets thermiques, une première partie remet en perspective la notion d'espacement optimal dans les réseaux d'émetteurs décrit par de nombreux travaux de modélisation purement électrostatique. Une seconde partie est ensuite dédiée à l'étude de l'établissement d'un couplage thermique entre émetteurs à proximité au cours de l'émission de champ thermoassisté, une interaction jamais étudiée jusqu'ici. Les implications de cette interaction sur le courant sont discutées.

Le chapitre 5 justifie, sur la base des résultats du chapitre 4 sur le couplage thermique, une méthode de réduction de dimension permettant de simuler indépendamment l'échauffement de chaque émetteur en géométrie 2D axisymétrique de manière approchée. L'erreur résiduelle associée à cette simplification est évaluée et un domaine de confiance est donnée pour la validité de l'approximation.

Le chapitre 6 propose de mettre à profit cette méthode pour modéliser l'émission simultanée d'un grand nombre de nanostructures de carbone, reprenant les caractéristiques des émetteurs à effet de champ utilisé dans la source d'électron type FEA développée par Thales. Après une analyse de la stabilité thermique d'un émetteur individuel, le chapitre analyse l'influence de la statistique de croissance des nanostructures sur les performances d'émission de la source.

Le manuscrit s'achève sur une conclusion générale qui résume point par point les principaux résultats de cette thèse et s'ouvre sur les perspectives pour de futurs travaux.

## Références

*« L'éternité, c'est ce qu'il y a de plus fragile, c'est du papier. Qu'est-ce qui reste de tout le passé? Non pas les idées, parce qu'elles s'envolent, mais des mots écrits. »*

– Jean d'Ormesson

(Entretien avec Bernard Pivot, juin 1978)

- [1] Robert G. ARNS. « The High-Vacuum X-Ray Tube : Technological Change in Social Context ». en. In : *Technology and Culture* 38.4 (oct. 1997), p. 852. ISSN : 0040165X. DOI : [10.2307/3106952](https://doi.org/10.2307/3106952). URL : <https://www.jstor.org/stable/3106952?origin=crossref> (visité le 02/07/2021) (cf. p. 1).
- [2] W. P. DYKE et al. « The Field Emission Initiated Vacuum Arc. I. Experiments on Arc Initiation ». In : *Physical Review* 91.5 (sept. 1953), p. 1043-1054. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.91.1043](https://doi.org/10.1103/PhysRev.91.1043) (cf. p. 3, 4).
- [3] W. W. DOLAN, W. P. DYKE et J. K. TROLAN. « The Field Emission Initiated Vacuum Arc. II. The Resistively Heated Emitter ». en. In : *Physical Review* 91.5 (sept. 1953), p. 1054-1057. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.91.1054](https://doi.org/10.1103/PhysRev.91.1054). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.91.1054> (visité le 10/09/2020) (cf. p. 3).
- [4] L. W. SWANSON et G. A. SCHWIND. « Chapter 2 A Review of the Cold-Field Electron Cathode ». en. In : *Advances in Imaging and Electron Physics*. T. 159. Advances in Imaging and Electron Physics. Elsevier, jan. 2009, p. 63-100. DOI : [10.1016/S1076-5670\(09\)59002-7](https://doi.org/10.1016/S1076-5670(09)59002-7). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1076567009590027> (visité le 05/12/2020) (cf. p. 3).
- [5] Kunihiko KAWAKITA et al. « Development of microfocused x-ray source by using carbon nanotube field emitter ». en. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 24.2 (2006), p. 950. ISSN : 10711023. DOI : [10.1116/1.2183785](https://doi.org/10.1116/1.2183785). URL : <http://scitation.aip.org/content/avs/journal/jvstb/24/2/10.1116/1.2183785> (visité le 15/06/2020) (cf. p. 3).
- [6] Eric MINOUX. « Sources électroniques à base de nanotubes de carbone - Application aux tubes amplificateurs hyperfréquence. » fr. Thèse de doct. Ecole Polytechnique X, avr. 2006. URL : <https://pastel.archives-ouvertes.fr/pastel-00001904/document> (visité le 22/08/2018) (cf. p. 3).
- [7] Khaled Almoussa ALMAKSOUR. « Étude de l'émission cathodique sous vide en présence d'un champ électrique intense et des paramètres physiques gouvernant son intensité ». fr. Thèse de doct. Paris : Université Paris Sud - Paris XI, jan. 2014. URL : <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01014658/document> (cf. p. 4).

- [8] Ville JANSSON et al. « Growth mechanism for nanotips in high electric fields ». en. In : *Nanotechnology* 31.35 (août 2020), p. 355301. ISSN : 0957-4484, 1361-6528. DOI : [10.1088/1361-6528/ab9327](https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab9327). URL : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6528/ab9327> (visité le 10/12/2020) (cf. p. 3).
- [9] A.V. BATRAKOV, D.I. PROSKUROVSKY et S.A. POPOV. « Observation of the Field Emission from the Melting Zone Occurring Just before Explosive Electron Emission ». In : *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation* 6.4 (Aug./1999), p. 410-417. ISSN : 10709878. DOI : [10.1109/94.788735](https://doi.org/10.1109/94.788735) (cf. p. 4).
- [10] F. GIUBILEO et al. « Local Probing of the Field Emission Stability of Vertically Aligned Multi-Walled Carbon Nanotubes ». In : *Carbon* 47.4 (avr. 2009), p. 1074-1080. ISSN : 00086223. DOI : [10.1016/j.carbon.2008.12.035](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2008.12.035) (cf. p. 4).
- [11] Anatoly G. KOLOSKO et al. « Investigation of the Current Level Instability of the Multitip Field Emitters with Computerized Field Emission Projector ». In : *Journal of Vacuum Science & Technology B* 38.6 (nov. 2020), p. 062806. ISSN : 2166-2746, 2166-2754. DOI : [10.1116/6.0000622](https://doi.org/10.1116/6.0000622) (cf. p. 4).





# Chapitre 1

## Développement du cadre théorique et état de l'art technologique de l'émission électronique par effet de champ

*« L'histoire, si on la considérait comme autre chose que des anecdotes ou des dates, pourrait transformer de façon décisive l'image de la science dont nous sommes actuellement empreints. »*

---

Thomas Khun  
(La Structure des révolutions scientifiques  
– 1962)

### Sommaire

---

<b>1.1 Établissement d'un cadre théorique</b> . . . . .	<b>9</b>
<b>1.2 Développements technologiques autour de l'émission électronique</b> . . . . .	<b>14</b>
1.2.1 Sources d'électrons dans les tubes électroniques . . . . .	14
1.2.2 Microscope à émission de champ . . . . .	16
1.2.3 Succès et limites des émetteurs de type Müller . . . . .	18
1.2.4 Développement des réseaux d'émetteurs à effet de champ . . . . .	19
<b>1.3 Émission électronique par effet de champ et claquage électrique sous vide</b> . . . . .	<b>21</b>

---

L'émission électronique par effet de champ est un phénomène qui a occupé les physiciens pendant plus d'un siècle. Sa compréhension théorique a été une des premières réussites de la mécanique quantique et sa maîtrise technologique a ouvert de nombreuses applications. Ce chapitre résume dans un premier temps la chronologie des résultats expérimentaux et développements analytiques ayant abouti au cadre théorique moderne décrivant le phénomène d'émission électronique par effet de champ. Nous détaillons ensuite les implications technologiques de ce phénomène à travers une revue des applications principales – passées et actuelles – qu'il a permis d'améliorer, voire tout simplement de concevoir. Enfin, la dernière section propose une courte revue de littérature des différents scénarios dans lesquelles l'émission de champ depuis le sommet d'aspérités indésirables à la cathode est supposée être à l'origine du claquage électrique.

### 1.1 Des premières observations de l'émission de champ à l'établissement d'un cadre théorique

Il est utopique d'espérer pouvoir donner une date précise unique pour la découverte d'un nouveau phénomène ou d'un nouvel objet scientifique. D'ailleurs, il est tout aussi délicat d'attribuer ces

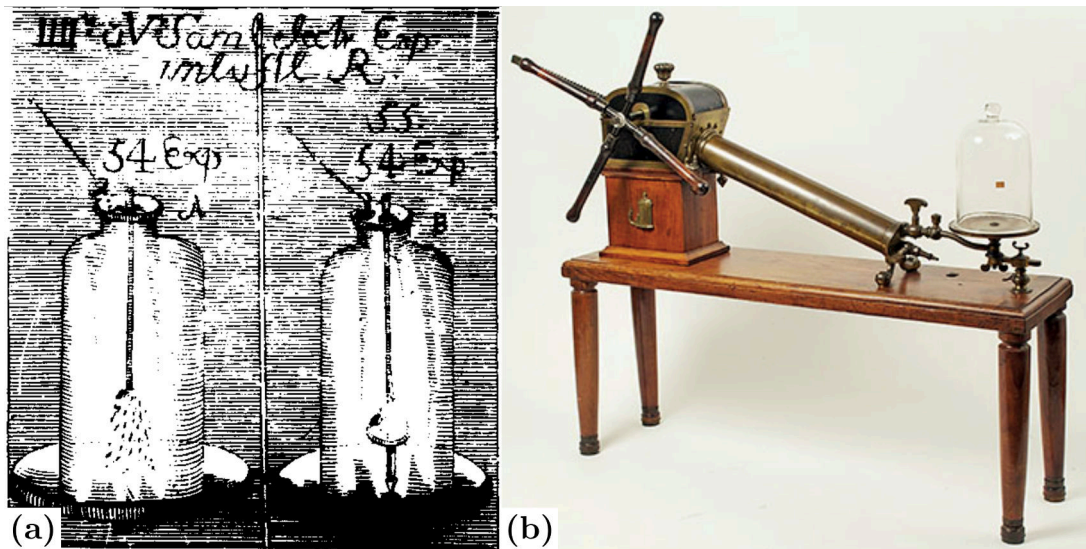


FIGURE 1.1 – (a) Schéma de J. F. Hartmann dans son écrit de 1766 (*Electrische Experimente im luftleeren Raum*) des expériences de Winkler avec des tiges métalliques chargées sous vide. Crédit : Christian Kleint [1] (*in ref.* Fig. 11). (b) Photographie d'une pompe à air de Jan Van Musschenbroek (fin 18e) très similaire à celle utilisée par Winkler. La pompe est reliée à une cloche en verre sur socle de métal. Crédit : blog du Musée Boerhaave à Leyde (Pays-Bas).

découvertes à seulement quelques grands personnages quand on connaît la véritable aventure humaine qu'est la Recherche scientifique. Pour des contraintes évidentes de temps et d'espace cependant – cette thèse n'ayant pas vocation à être soutenue en histoire des sciences – il est souvent d'usage de faire référence à quelques événements clés résumés en quelques dates et protagonistes majeurs. Il faut alors seulement être conscient que la vision de l'avancement scientifique qui résulte de cette réduction (au sens du réductionnisme) est grandement biaisée.

L'avertissement ayant été donnée, tentons tout de même de résumer à travers les jalons les plus marquant le développement historique du phénomène qui nous intéresse : l'émission électronique, et plus particulièrement l'émission électronique induite par effet de champ (que l'on appellera souvent émission de champ par abus de langage).

Si l'on se réfère aux recherches de Christian Kleint [1], les premiers travaux en lien avec l'émission électronique remontent au siècle des Lumières, avec les expériences de Johann Heinrich Winkler à Leipzig [2]. En particulier, une de ces expériences consistait en une pointe métallique insérée dans une enceinte de verre, fermée par un socle métallique (Fig. 1.1a), le tout mis sous tension à l'aide de l'électricité statique générée par les frottements du métal sur une sphère creuse de soufre solide. L'air de l'enceinte était ensuite raréfié par le moyen des pompes à vide de l'époque (Fig. 1.1b). Notons que l'invention de la pompe à vide - du moins de la pompe à air - remonte à la moitié du 17e siècle [3]. Kleint parle alors de premières décharges électriques induites par émission de champ en atmosphère raréfiée. Toutefois, comme le note Richard Forbes [4] (*in ref.* Sec. II-A), il est difficile d'être rétrospectivement sûr qu'un courant d'électrons émis par effet tunnel soit effectivement à l'origine des décharges observées par Winkler.

De même, il est plausible, mais reste incertain que des phénomènes d'émission électronique aient eu lieu dans nombre des expériences qui suivirent sur les décharges électriques sous vide au cours de la deuxième moitié du 19e siècle. En fait, les premiers tubes à vide basaient leur production d'électrons sur le phénomène de décharges électriques en atmosphère raréfiée. Trois régimes de décharge sont alors à distinguer, caractérisés par des relations courant/tension bien distinctes. En dessous de la tension de claquage du gaz (tension au-delà de laquelle le gaz devient conducteur), les décharges sont

produites par avalanche de Townsend (démultiplication des électrons par collision ionisante successive), comme c'est par exemple le cas dans les tubes de Crookes. Au-delà de la tension de claquage, on passe en régime de décharge lumineuse, utilisé par exemple par les tubes de Geissler. Si l'on augmente davantage le courant au-delà de la tension de claquage, on provoque la formation d'un arc électrique. On mentionne généralement les travaux de R.W. Wood en 1897 [5] comme les premiers à avoir rapporté une description de ce phénomène. Rendus possibles par l'amélioration des techniques de verrerie et de pompage, Wood décrit la formation d'arcs électriques entre deux électrodes sous vide séparées d'une distance ajustable. Bien qu'une fois encore l'implication de l'émission de champ soit incertaine, cette référence reste pertinente du fait que la mise en cause de l'émission électronique depuis des rugosités de surface dans le déclenchement d'un arc électrique inter électrode (*i.e.* le claquage haute tension sous vide) est un mécanisme physique encore à l'étude aujourd'hui.

Il est par ailleurs important de noter que jusqu'à cette époque, en 1897 justement, le concept d'électron n'existait pas encore. C'est l'étude de ces phénomènes de décharge électrique sous vide (plus particulièrement des rayons cathodiques) qui mena J. J. Thomson à mettre en évidence le concept d'électron (d'abord sous le nom de "corpuscule" [6]) comme particule de masse fixe et sous-constituante des atomes. Son discours du 30 avril 1897 devant la Royal Institution et la publication qui en découle [7] posent la première brique de l'explication théorique moderne de l'émission électronique.

En 1901, prenant appui sur la théorie cinétique des gaz et la thermodynamique, O. W. Richardson [8, 9] traduit les implications de l'électron en une loi théorique exprimant le courant thermoionique en fonction de la température du métal :  $I \propto T^{\frac{1}{2}} \exp(-\varphi/k_B T)$ , qu'il corrige par la suite en la formule bien connue aujourd'hui de l'émission thermoionique :

$$I_{RD} = A_G T^2 \exp\left(-\frac{\varphi}{k_B T}\right) \quad (1.1)$$

où  $A_G$  est la constante de Richardson<sup>1</sup>,  $k_B$  est la constante de Boltzmann et  $\varphi$  le travail de sortie.

Peu de temps plus tard, Albert Einstein publie son désormais très célèbre article de 1905 [11, 12], reliant l'émission photo-électrique – initialement observé en 1887 par Heinrich Hertz [13] – à l'extraction d'un électron par un photon (quanta d'énergie électromagnétique) d'énergie supérieure à son travail de sortie.

Pour ce qui est de l'émission électronique par effet de champ, il faut attendre 1910 pour que Franz Rother et Julius Edgar Lilienfeld mettent en évidence l'émission d'électrons sous l'effet d'un champ électrique intense à température ambiante [14], bien en deçà des températures requises pour l'émission thermoionique. Ils nommeront dans un premier temps cet effet l'émission autoélectronique. S'en suit une série d'expériences sur la mise au point de tubes à rayon X basées sur des décharges électriques induites par émission autoélectronique, avec des courants de plusieurs milliampères pour des tensions de plusieurs kilovolts [15].

En 1923, Schottky, qui avait observé l'augmentation des courants de saturation thermique par l'application de champs forts, suggère que l'émission autoélectronique pourrait être en substance une émission d'origine thermique avec un travail de sortie diminué par la présence du champ électrique. Mais les mesures expérimentales gagnant en précision, les travaux de Millikan et Eyring en 1926 [16] puis de Millikan et Lauritsen en 1928 [17] permettent d'établir une relation empirique entre courants émis  $I_{ML}$  et champ appliqué  $F$  qui invalide les prédictions théoriques de Schottky :

$$I_{ML} = C \exp\left(-\frac{b}{F}\right), \quad \Rightarrow \ln(I_{ML}) \propto \frac{1}{F} \quad (1.2)$$

là où les implications théoriques de Schottky prédisaient un logarithme du courant proportionnel à la racine carrée du champ [16] (*in ref.* Fig. 5). Les courants mesurés proviennent de filaments de tungstène

1. La valeur précise de la constante  $A_G$  pose en revanche encore question. Il est aujourd'hui communément admis de l'écrire sous la forme  $A_G = \lambda_R A_0$  avec  $A_0 = 4\pi m e k^2 / h^3$  une constante universelle reliée à la *supply function* et  $\lambda_R$  un facteur correctif lié au matériau [10].

tène thoriés soumis à des champs allant jusqu'à deux dixièmes de gigavolt par mètre ( $\sim 0.2 \text{ GV/m}$ ). Millikan et Eyring parlent alors de "courant de champ" ("*field-current*" en anglais). En revanche, les mesures montrent que l'émission provient de sites isolés. La position et l'intensité de ces sites sont toutefois modifiées par des processus de conditionnement ce qui mène les auteurs à conclure que ces sites correspondraient à des aspérités de surface qui renforcent le champ à leur sommet :

« *In explanation of these results, it is suggested that the field currents are due to conduction electrons pulled from minute peaks on the surface, the fatigue effects of both current treatment and heat treatment being due to the rounding off of these peaks by positive ion bombardment or by temperature. Chemical changes may also alter the surface.* » [16] (abstract)

En parallèle de l'amélioration des mesures expérimentales se poursuit le développement théorique de la mécanique quantique (initiée au début du 20e siècle avec l'hypothèse des quantas de Planck). Ainsi, l'utilisation de la "nouvelle mécanique" permet à Fowler et Nordheim en 1928 de dériver une relation théorique entre courant et tension :

« [We] *treat the theory in the simple straight-forward way which is now possible in the new mechanics, using the revived electron theory of metals which we owe to Sommerfeld.* » [18] (in ref. §1)

Leur première formule se base sur la résolution exacte de l'équation de Schrödinger (1925) pour une barrière de potentiel 1D de forme triangulaire (Fig. 1.2a). C'est l'effet tunnel à travers cette barrière de potentiel qui permet d'expliquer l'émission d'un courant à température ambiante (les auteurs parlent cette fois d'émission de champ fort, *strong field emission* en anglais, par opposition à l'émission thermoionique, *thermionic emission*). L'équation dite de Fowler-Nordheim s'écrit :

$$I_{FN} = a(\varphi)F^2 \exp\left(-b \frac{\varphi^{3/2}}{F}\right) \quad (1.3)$$

Où  $b$  est une constante universelle et  $a$  une constante spécifique du matériau dépendant de son travail de sortie  $\varphi$ . Cette équation donnera par la suite lieu à l'analyse des données courant-tension *via* les plots dits de Fowler-Nordheim qui trace le logarithme du courant en fonction de l'inverse du champ –  $\ln(I)$  vs  $1/F$  – pour exhiber la dépendance linéaire d'une éventuelle émission de champ.

De la toute récente mécanique quantique découle ainsi naturellement la dépendance exponentielle en l'inverse du champ, initialement mis en évidence par les résultats empiriques de l'équipe de Millikan. Toutefois, pour obtenir des courants équivalents à ceux observés par Millikan, allant du nanoampère au miliampère, le champ électrique dans l'équation de Fowler Nordheim doit atteindre plusieurs GV/m. Cela vient renforcer l'hypothèse de Millikan selon laquelle l'émission provient de micro aspérités renforçant le champ à leur sommet (le facteur de renforcement devant alors être de quelques dizaines,  $\beta \gtrsim 10$ ). Henderson et Dahlstrom écrivent à ce sujet en 1939 :

« *Experiments by the General Electric Company of London and by Millikan and his co-workers established the first empirical field-current equation,*

$$i = Ce^{-b/F} \quad [\text{cf. Eq. 1.2}]$$

[...] *The observed variations in  $b$  led to the conclusion that the emission was from small localized areas or "points" where the field computed from the geometry of the apparatus is greatly magnified.* » [19] (in ref. Introduction, §2)

Un second article par Nordheim [20] est publié dans la foulée<sup>2</sup>, élargissant la méthode de résolution pour intégrer l'effet initialement proposé par Schottky : la contribution à l'émission due à l'abaissement de la barrière de potentiel par l'effet de charge image (ce qui revient à une réduction

2. Il est à noter que Nordheim commet alors une erreur mathématique dans l'évaluation d'une fonction qui sera corrigée bien plus tard en 1953 par Burgess *et al.* [21]

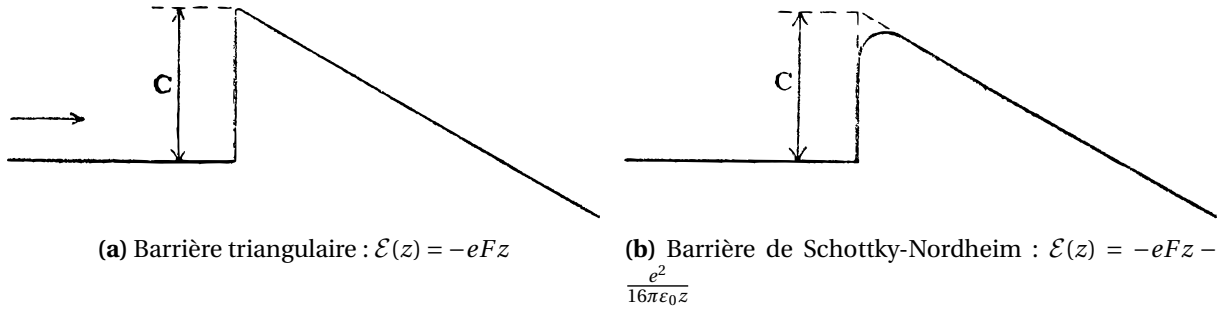


FIGURE 1.2 – Tracés des barrières de potentiel extrait de l'article de Fowler et Nordheim [18]. (a) et (b) correspondent respectivement aux figures FIG. 1. (ii) et FIG. 2. (ii) dans l'article.  $C$  correspond à l'énergie du niveau le plus bas de la bande de conduction, noté  $\epsilon_C$  dans cette thèse.

du travail de sortie effectif). La forme de barrière qui en découle est aujourd'hui communément utilisée sous la dénomination de barrière Schottky-Nordheim (cf. Fig. 1.2 et 2.7).

Ainsi, le développement de Fowler et Nordheim pose la première brique théorique de la description moderne de l'émission électronique par effet de champ. En revanche, l'influence de la température dans l'émission de champ – et plus globalement la transition vers l'émission thermoionique – est mise de côté, le calcul étant simplifié par l'hypothèse que  $k_B T$  reste négligeable devant l'énergie de Fermi  $\epsilon_F$  [18] (*in ref.* Sec. 3).

Il faut attendre les années 1950 et les travaux analytique de Miller, Murphy et Good [22, 23], pour obtenir un développement analytique satisfaisant de la contribution thermique au courant dans l'émission par effet de champ. Cette contribution apparait sous la forme d'un facteur correctif de la formule de Fowler et Nordheim (Eq. 1.3) et donne la forme du courant dite de Murphy et Good :

$$I_{MG} = \left( \frac{\pi k_B T / d}{\sin(\pi k_B T / d)} \right) \times a(\varphi) \frac{F^2}{t(F)} \exp \left( -b \frac{\varphi^{3/2}}{F} v(y) \right), \quad (1.4)$$

où

$$\frac{1}{d} = \frac{2\sqrt{2m\varphi}t(F)}{3\hbar eF} \quad (1.5)$$

Par ailleurs, les fonctions  $t(F)$  et  $v(F)$  permettent la prise en compte de la charge image – comme proposé par Nordheim – qui vient modifier la barrière triangulaire. Ces fonctions, ainsi que l'influence du facteur correctif sur la variation de l'émission avec la température, seront détaillées au chapitre suivant.

Dans cet intervalle de temps, l'avancée de la compréhension théorique de l'émission de champ permet à J. E. Henderson et R. K. Dahlstrom d'établir en 1940 un protocole expérimental pour mesurer la distribution énergétique des électrons émis [19]. Les résultats expérimentaux ainsi obtenus permettent de confirmer que dans le cas de l'émission par effet de champ, une majorité des électrons sont bien émis avec une énergie autour du niveau de Fermi, sans avoir acquis une énergie égale au travail de sortie. Par ailleurs, augmenter la température de l'émetteur mène à des distributions énergétiques légèrement plus élevées. Ce sont ces résultats expérimentaux qui poussent Henderson à s'intéresser plus directement à l'influence sur la thermique de l'émetteur du bilan d'énergie entre les électrons émis et ceux qui les remplacent, processus que l'on appellera plus tard l'effet Nottingham. Il publie ainsi l'année suivante une nouvelle étude expérimentale avec G. M. Fleming qui met en évidence une perte d'énergie thermique au cours de l'émission à haute température d'une pointe en tungstène [24]. Par l'intermédiaire d'un thermocouple, l'expérience indique une légère augmentation de la puissance requise pour maintenir la température de l'émetteur à mesure que le courant thermoionique augmente. En reliant cet écart de puissance avec le bilan d'énergie thermique par électron dans le cadre de la théorie de Sommerfeld (statistique de Fermi-Dirac des électrons de conduction), l'article parvient à une prédiction cohérente du travail de sortie du tungstène qui vient appuyer la

solidité de la mesure expérimentale. C'est la première preuve expérimentale (bien qu'indirect) de ce processus qui avait été prédit plus tôt par la théorie, mais n'avait pas pu être mis en évidence jusqu'ici :

*« Like Lilienfeld, Cunradi had again tried to measure a cooling or warming effect of the emitter during emission (Nottingham effect). The results were not very conclusive, however, and were obviously in favour of a heating effect. » [1] (in ref. Sec. 5, §4)*

Le passage d'un bilan d'énergie positif (effet chauffant) à un bilan négatif (effet refroidissant), ainsi que la valeur précise de l'énergie des électrons de remplacement ont par la suite été sujets à controverse. Il semble d'ailleurs que c'est la contribution de W. B. Nottingham à cette controverse [25] qui donna son nom au phénomène physique, l'effet Nottingham. Cette controverse dura une vingtaine d'années avant que les travaux théoriques et expérimentaux plus poussés menés dans les années 1960 [26, 27, 28] n'apportent un accord relativement bon de l'effet Nottingham avec la théorie et traduisirent le concept de bilan d'énergie par électron en une densité de flux de chaleur à la surface de l'émission.

La mise en équation de l'effet Nottingham associé à l'équation de Murphy et Good pose la base du cadre théorique de l'émission électronique par effet de champ. Pour prédire précisément l'évolution de l'échauffement d'une pointe émettrice, il faut coupler ces équations avec celles de la chaleur et du courant sur une géométrie réaliste. Résoudre analytiquement ce système d'équations autocohérent est délicat et nécessite un grand nombre d'hypothèses. Les travaux à ce sujet sont restreints à des géométries 1D et à une étude stationnaire. Ils se limitent généralement aux formules approximatives de Murphy et Good pour le régime d'émission intermédiaire. Une évaluation numérique de toute cette physique permet d'aller plus loin, comme nous le verrons dans les prochains chapitres de cette thèse.

## 1.2 Développements technologiques autour de l'émission électronique

Maintenant que nous avons vu dans les grandes lignes comment s'est construit le cadre théorique actuel permettant de décrire l'émission électronique par effet de champ, passons en revue les principales applications technologiques dans lesquelles la compréhension de ce phénomène a joué – ou joue encore – un rôle.

### 1.2.1 Sources d'électrons dans les tubes électroniques

Depuis la fin du 19e siècle et jusqu'à la moitié du 20e siècle, le développement du tube électronique et de ses applications en médecine [29], en communication [30, 31] et en informatique [32] a fortement contribué à asseoir la science physique comme moteur de changements sociétaux.

Les tubes électroniques sont des dispositifs relativement simples en essence. Ils consistent en un tube en verre généralement scellé sous vide (ou connecté à une pompe à vide) contenant au moins deux électrodes et un moyen de production d'électrons (une source d'électrons). La forme la plus simple de tube à vide, la diode, consiste en une cathode émettrice d'électrons et une anode réceptrice. En laissant passer le courant uniquement dans un sens (de la cathode vers l'anode, lorsque la bonne polarisation est respectée), la diode a permis la mise au point des premiers redresseurs (capable de convertir un courant alternatif en un courant continu) et marque la naissance de l'électronique sous vide.

L'ajout d'une troisième électrode sous la forme d'une grille à potentiel modulable entre la cathode et l'anode (grille de contrôle) permet le contrôle du courant transmis. Une charge en série connectée à l'anode convertit ensuite la variation de courant en variation de tension et de puissance. La triode ainsi nommée offre alors la possibilité d'amplifier la puissance ou la tension du signal d'entrée en modulant la portion de courant émis par la cathode parvenant à l'anode. Pensée par Lee de Forest en 1906, cette innovation "incrémentale" aux airs anodins a en fait permis l'essor de la radio

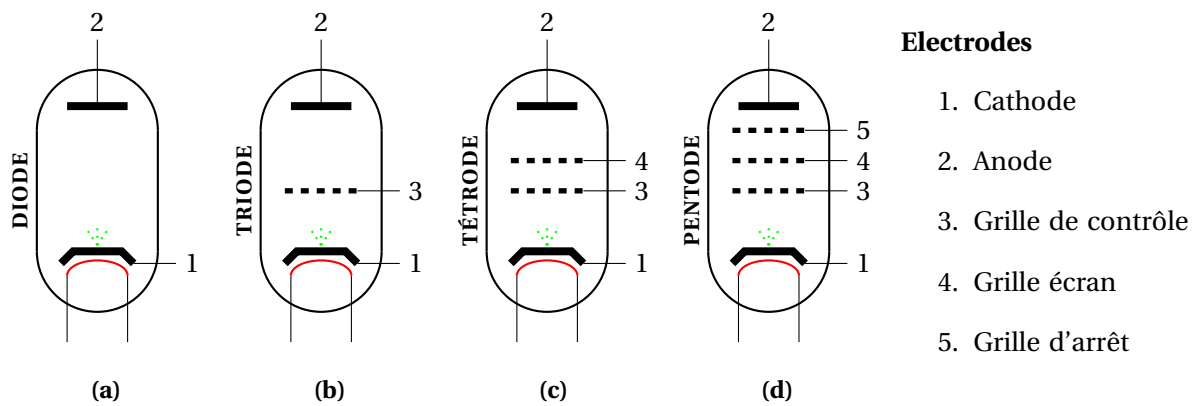


FIGURE 1.3 – Schéma récapitulatif de la complexification premiers tubes à vide pour l'électronique sous vide (ajout successif d'électrodes). La source d'électrons représentée ici est une cathode thermo-ionique avec chauffage indirect (symbolisé par le filament rouge). Certaines versions plus modernes utilisent une source d'électrons par effet de champ.

et des communications longues distances [33]. Manquant au télégraphe, la triode amplificatrice permettra notamment aux premiers réseaux téléphoniques de s'affranchir des relais intermédiaires qui servaient à répéter le signal pour compenser l'énergie dissipée sur les grandes distances.

La tétrode avec une quatrième électrode (la grille-écran) puis la pentode avec une cinquième électrode (la grille d'arrêt) poursuivront l'amélioration des amplificateurs, respectivement en supprimant la capacité résiduelle entre la grille de contrôle et l'anode (effet Miller) et en permettant de conserver les électrons secondaires émis par l'anode. La figure 1.3 schématise l'évolution des tubes électroniques, de la diode à la pentode.

En ajoutant à cela le simple rôle d'interrupteur d'une diode, les tubes électroniques ont aussi (et surtout) permis la mise au point des premiers calculateurs électroniques. Ainsi en 1943, le circuit logique de l'ordinateur Colossus – le premier ordinateur programmable entièrement électronique – est basé sur un réseau à couplage croisé de plus d'un millier de tubes à vide amplificateurs. S'en suit la première machine Turing complète : l'ENIAC pour *Electronic Numerical Integrator and Computer*. Achèvement en 1945, elle comptait 18000 tubes à vide, pour une consommation électrique de 200 kW et un poids de 30 tonnes.

Pour aller plus loin dans le développement des ordinateurs, il fallut attendre la révolution des semi-conducteurs et l'apparition du premier transistor fonctionnel en 1947. Plus petit, plus léger, moins consommateur en électricité et avec une fiabilité et une durée de vie bien plus élevée, les transistors remplacèrent rapidement les tubes à vide dans la plupart des applications électroniques. Toutefois, les semi-conducteurs restent peu adaptés aux environnements extrêmes comme les températures élevées ou les radiations intenses. Ainsi, le développement des tubes à vide se poursuit dans le domaine des hautes puissances et hautes fréquences. La figure 1.4 regroupe les domaines principaux, parmi lesquels se trouve par exemple l'amplification d'ondes électromagnétiques pour les accélérateurs de particules, les systèmes de communication pour l'aviation et le spatial ou le développement de radar pour certaines applications militaires nécessitant une meilleure robustesse que celle offerte par les semi-conducteurs.

Toutes ces applications reposant sur les tubes électroniques nécessitent une source d'électrons adaptée. Pendant toute la première moitié du 20<sup>e</sup> siècle, les tubes électroniques utilisaient essentiellement des cathodes chaudes, plus économiques et plus simples à fabriquer que les cathodes à effet de champ, et surtout basées sur le phénomène d'émission thermoionique que l'on commença à comprendre dès 1901 grâce aux travaux théoriques de O. W. Richardson, date à laquelle, on l'a vu, l'émission électronique par effet de champ n'avait même pas encore été observée en tant que telle.

En fait, c'est précisément la volonté de s'affranchir d'un certain nombre de contraintes impo-



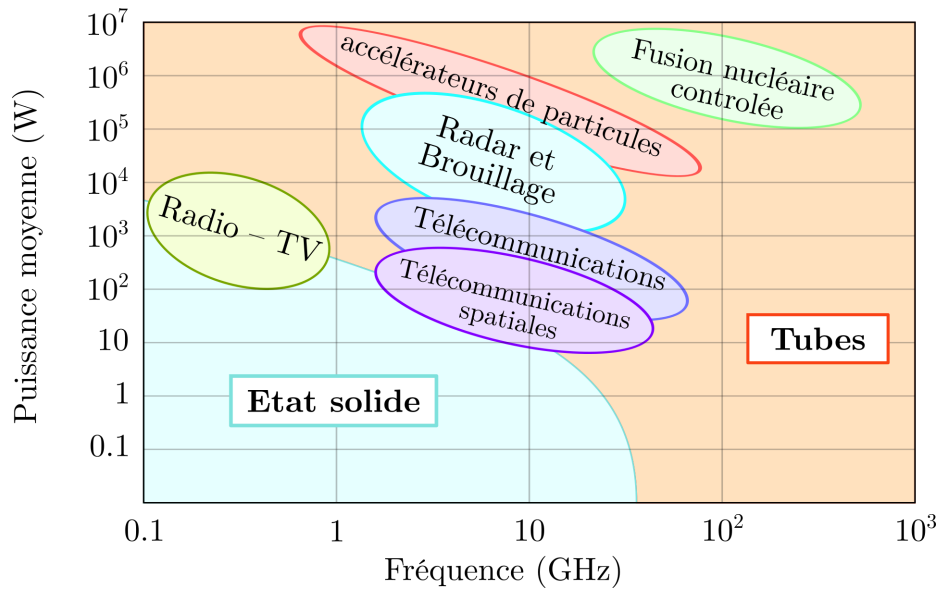


FIGURE 1.4 – Diagramme Puissance-Fréquence des amplificateurs de signal électrique et d'onde électromagnétique. Reproduit à partir de [34] (*in ref.* Fig. 1.2).

sées par les cathodes thermoioniques qui mena J.E. Lilienfeld à étudier plus en détail le phénomène d'émission par effet de champ dans les années 1910. En effet, la nécessité d'un chauffage important pour obtenir une émission thermoionique notable présente un certain nombre de désavantages, parmi lesquels on peut citer [35] :

- un allumage conditionné par les temps caractéristiques de chauffage et de refroidissement.
- le besoin d'une alimentation haute puissance pour le chauffage de la cathode.
- une faible durée de vie de la cathode à cause des hautes températures (la durée de vie chute exponentiellement avec l'augmentation du courant émis)
- une miniaturisation limitée : Contrairement à l'émission de champ, la modulation du courant thermoionique nécessite une troisième électrode, la grille de contrôle. De plus, à cause du chauffage de la cathode, la grille de contrôle doit être placée suffisamment loin de la cathode pour ne pas subir de distorsion liée à la température (distance minimum d'environ  $100 \mu\text{m}$ ). Par ailleurs, un volume suffisant est requis pour intégrer le système de chauffage et un éventuel système de dissipation de chaleur.

Ainsi, c'est dans une perspective d'amélioration des tubes à vide pour la production de rayon X, sujet sur lequel travaillait Lilienfeld, que furent développés pour la première fois des tubes électroniques basés sur l'émission par effet de champ. Il faudra cependant attendre une meilleure compréhension théorique du phénomène et une maîtrise plus avancée du vide et de la haute tension pour permettre le développement de cathodes froides à effet de champ viable. Dans la lignée de ces avancées, les travaux expérimentaux de Müller dans les années 1940 marquèrent le début d'un intérêt grandissant pour l'émission électronique par effet de champ.

### 1.2.2 Microscope à émission de champ

Mis au point par Müller en 1937 [37], le microscope à émission de champ (FEM pour *Field Emission Microscope* ou *Field Electron Microscope*) est peut-être l'exemple le plus éloquent d'une application de l'émission par effet de champ qui aura eu une portée bien plus fondamentale que technologique. Il est important de ne pas confondre le FEM avec les technologies de microscopes électroniques, comme la microscopie électronique à balayage (MEB, ou SEM en anglais pour *Scanning Electron Microscopy*) dont on parlera plus loin.

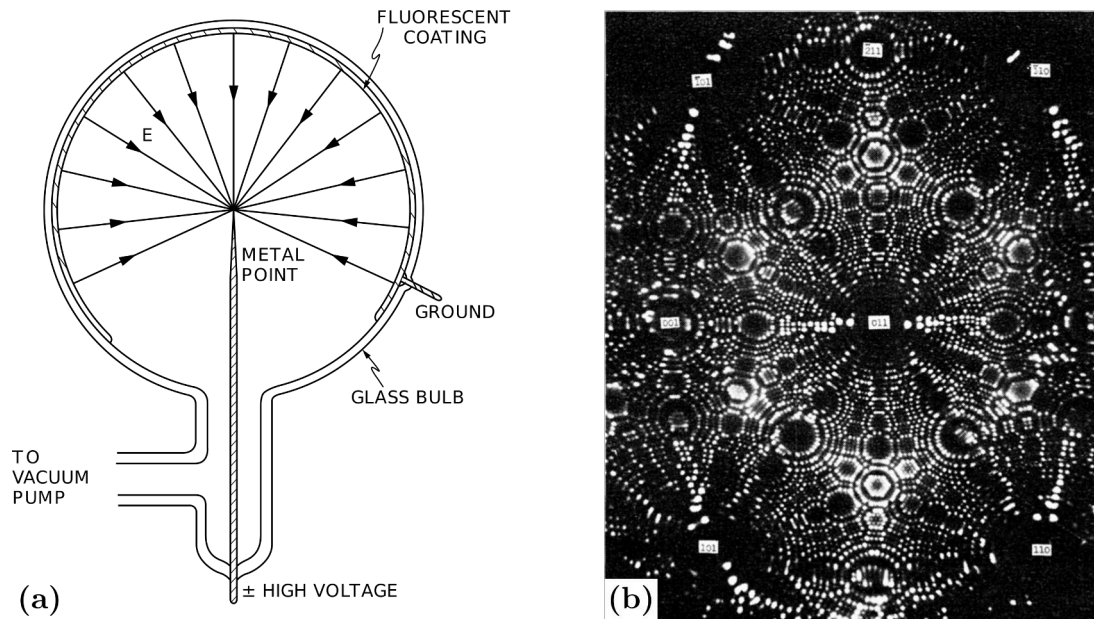


FIGURE 1.5 – (a) schéma simplifié du principe de microscope à émission de champ. (b) Image du courant produit par l'émission de champ d'une pointe en tungstène collectée par le revêtement fluorescent. Les patterns visibles sont directement reliés à l'organisation atomique de la surface émettrice. Crédit de l'image : Erwin Müller. Les figures proviennent du livre de Feynman [36] (*in ref.* Fig. 6-16 et 6-17).

Un FEM typique consiste en une pointe de métal très fortement effilé – de rayon au sommet  $r$  – jouant le rôle de la cathode et placée au centre d'une enceinte sphérique sous vide de rayon  $R$ . La pointe fait alors face à un revêtement fluorescent déposé sur l'anode (voir Fig. 1.5).

Une fois sous très haute tension, le renforcement de champ au sommet de la pointe induit une émission électronique par effet de champ. L'amplitude du champ électrique étant centrale dans l'émission, le profil de l'émetteur doit être conçu pour maximiser l'effet de pointe. Le design retenu, parfois appelé aujourd'hui émetteur de Müller, est généralement une pointe en tungstène obtenue par gravure électrolytique d'un filament de tungstène commercial [39]. Cette technique permet d'obtenir des rayons au sommet de l'émetteur allant de  $1 \mu\text{m}$  à  $100 \text{ nm}$  (des améliorations à la fin du 20e siècle ont permis d'obtenir des rayons de l'ordre de la dizaine de nanomètres [40]). La figure 1.6 montre deux tels émetteurs obtenus par gravure électrolytique, sous champ DC et AC respectivement.

Dans l'enceinte sphérique, les électrons émis vont alors se propager le long des lignes de champ de sorte que chaque point sur la surface fluorescente correspond de manière quasi exacte à sa projection radiale à la surface de l'émetteur. L'écran du microscope donne ainsi une image de la distribution de la densité de courant émise depuis la surface de l'émetteur, agrandie par un facteur de grossissement de l'ordre de  $R/r$  allant de  $10^5$  à  $10^6$ .

Tout l'intérêt de la microscopie à émission de champ est que l'image résultant de l'émission traduit des informations caractéristiques du matériau observé, notamment la forme de la pointe de l'émetteur, mais surtout l'orientation des plans cristallins et les variations de travail de sortie associées. Sur la figure 1.5b, on voit la formation de patterns bien spécifique alternant des zones lumineuses et sombres. Les zones sombres correspondant à une émission moindre proviennent de régions de l'émetteur avec un plus grand travail de sortie ou un champ électrique plus faible, et inversement pour les régions claires<sup>3</sup>. L'analyse de ces images permet aussi de détecter la présence

3. Il est nécessaire de noter ici que l'image présentée est en fait obtenue par microscope ionique à effet de champ (FIM pour *Field-Ion Microscope*) : la polarisation des électrodes est inversée et un gaz d'imagerie, typiquement de l'hélium, est injecté en faible pression dans l'enceinte. Ainsi, les atomes de gaz au voisinage de la pointe peuvent devenir ionisés en raison du très fort champ électrique. C'est alors le courant généré par les ions, accélérés vers la surface fluorescente, qui produit l'image. Là où la résolution des images obtenues par FEM est limitée par l'agitation thermique des électrons et leur diffraction à environ  $25 \text{ \AA}$ , la masse plus importante des ions réduit ces effets et permet d'atteindre des résolutions jusqu'à

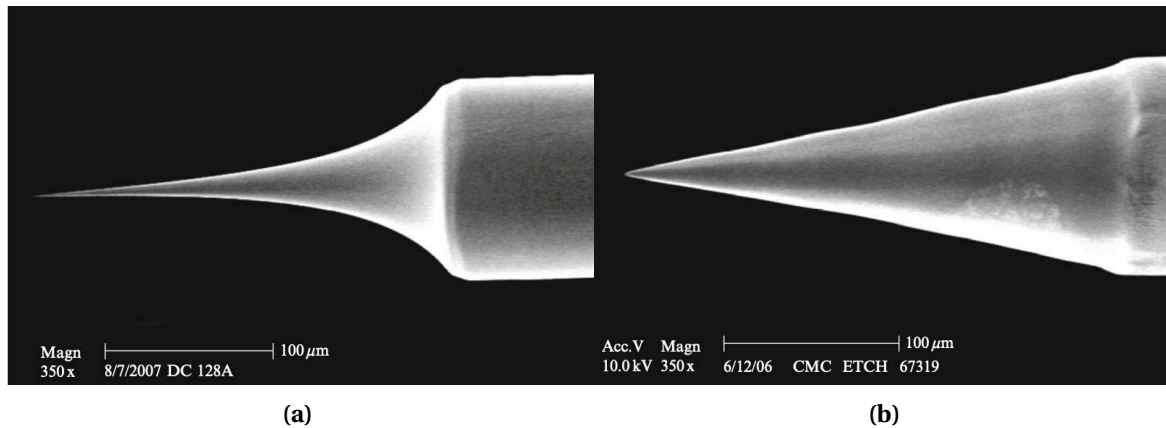


FIGURE 1.6 – Pointes en tungstène (émetteur de type Müller) obtenues par gravure électrolytique **(a)** sous champ DC (rayon typique entre 50 et 100  $nm$ ) et **(b)** sous champ AC (rayon typique entre 200 et 500  $nm$ ). Ces deux exemples montrent la forme typique des émetteurs utilisés pour les microscopes électroniques commerciaux basés sur l'émission par effet de champ. Le premier design est généralement préféré car permettant d'atteindre des rayons au sommet plus petit. Les images proviennent de la référence [38].

d'atomes de gaz adsorbés à la surface de l'émetteur.

De par son ingénieuse simplicité, le microscope à émission de champ – puis son extension, le microscope ionique à effet de champ ou FIM en anglais pour *Field-Ion Microscope* [41] – est resté pendant longtemps la méthode d'imagerie avec la meilleure résolution. Il a été un des premiers outils d'observation pour la physique des surfaces [42], permettant par exemple les premières observations du phénomène de diffusion de surface (*surface atom diffusion*) [43]. Le principal défaut du FEM reste toutefois d'être limité à l'observation de la pointe émettrice elle-même, ce qui restreint grandement les matériaux dont il permet d'étudier la structure cristalline. Aujourd'hui, le FEM est dépassé par les plus récentes techniques d'analyse en sciences des surfaces [44].

Il faut cependant noter que si la technique du FEM a fini par être mise de côté, les développements techniques concernant la pointe en tungstène (l'émetteur de type Müller) ont été repris par la suite pour concevoir les premières sources d'électron efficace par effet de champ.

### 1.2.3 Succès et limites des émetteurs de type Müller

Les expériences de microscopie à émission de champ ont mis en évidence une bien meilleure brillance (densité de courant par unité d'angle solide) des émetteurs de type Müller que les sources thermoioniques. En plus d'une forte brillance, les électrons émis par effet de champ à température ambiante ont une distribution énergétique plus resserrée. Ces deux avantages ont été la raison de l'intégration de ces émetteurs dans la conception de microscopes électroniques commerciaux à partir du milieu du 20<sup>e</sup> siècle :

« *The scanning microscope described here uses a field-emission tungsten tip as the source of electrons. Such sources are smaller and brighter than thermionic sources and therefore should be capable of providing smaller useful probe sizes. [...] it provides : (a) more than a thousand times increase in brightness over a hot filament source, (b) operation at room temperature which gives a measured energy spread as low as 0.192 eV and (c) an effective source diameter of about 30 Å.* » [45] (in ref. Sec. 2)

Les innovations incrémentales qui en ont découlé ont permis de descendre la résolution spatiale des microscopes électroniques à une échelle proche du nanomètre [46].

10 fois supérieures. Cette amélioration du dispositif a été élaborée par Müller bien après les premières images au FEM, en 1951 [41].

Si ces deux avantages ont permis l'utilisation des émetteurs pour l'application très spécifique de la microscopie électronique, Brodie et Spindt rappellent tout de même dans leur article de 1979 les principaux défauts des émetteurs de type Müller qui ont empêché le remplacement des sources thermoioniques par des cathodes froides dans les tubes à vide pour la plupart des autres applications [47] (*in ref.* Tab. 1). En fait, en plus d'une émission assez bruitée et requérant une très basse pression pour être stable, la difficulté à reproduire plusieurs émetteurs de facteur d'aspect très proche rend impossible l'opération fonctionnelle de plusieurs émetteurs en parallèle. La raison de cela est qu'un changement relativement faible en champ donne lieu à un fort changement en courant :

« For example, a 20% change in field from  $5 \times 10^7$  to  $6 \times 10^7$  V/cm would result in a change of current density from  $4 \times 10^5$  to  $4.8 \times 10^6$  A/cm<sup>2</sup> for a surface with a work function of 4.5 eV.  
» [47] (*in ref.* Introduction, §4)

Le facteur de renforcement de champ ne devrait donc pas varier de plus de quelques pourcents pour que tous les émetteurs puissent contribuer à l'émission, ce qui n'est pas le cas. Le courant total que l'on peut extraire se retrouve ainsi fortement limité par la faible surface d'émission d'un émetteur unique. Problème auquel s'ajoute le fait que la densité de courant de l'émetteur doit rester limitée à  $10^{8-9}$  A/m<sup>2</sup> pour éviter la destruction de l'émetteur, en particulier lorsque la pression d'opération n'est pas assez basse puisque le bombardement ionique induit par la pression résiduelle réduit fortement la durée de vie de ces émetteurs.

#### 1.2.4 Développement des réseaux d'émetteurs à effet de champ

En utilisant les nouvelles techniques de science des surfaces des années 70 (dépôt de couche mince et lithographie électronique) Spindt initia le développement d'un nouveau type de source à effet de champ [48] : les cathodes froides à réseau ou FEA pour *Field Emitter Array* en anglais. Basées sur l'émission de tout un réseau d'émetteurs micrométriques en molybdène gravé sur un substrat de silicium, les sources dites de Spindt offrent un courant total de l'ordre de la centaine de milliampères grâce à l'émission combinée de quelques milliers d'émetteurs. Les émetteurs de Spindt marquent le début d'une série de développements technologiques qui se poursuit encore aujourd'hui et qui vise à remplacer l'utilisation des sources thermoioniques par des sources FEA dans la plupart des applications d'électronique sous vide. Et pour cause, l'émission par effet de champ offre de manière générale une consommation moindre, une miniaturisation accrue, un allumage plus réactif et une meilleure commutabilité.

Ce sont précisément ces caractéristiques, amplifiées par l'amélioration constante des techniques de gravure à l'échelle micro/nanométrique, qui ont permis d'envisager toute une nouvelle gamme d'application pour la microélectronique sous vide, basée sur des sources d'électrons à effet de champ miniaturisé :

« The promising performance of the vacuum microelectronic devices (VMDs) along with limited ability of solid-state semiconductor micro-electronics to perform in harsh environments, such as severe temperatures or intense radiation, has inspired investigation of their use in a variety of applications including : high-power/speed amplifiers and switches, field emission displays, novel MEMS sensors [Micro Electro Mechanical Systems], communication system components for aviation, Hall effect thrusters, electrodynamic tethers, traveling wave tubes, space satellite communication and various types of radar, and finally key elements for the VMD-based integrated circuits. » [53] (*in ref.* Introduction, §1)

Dans cette optique, de nombreux autres types d'émetteurs et de configurations en réseau ont été étudiés depuis les années 70 et le début des sources de Spindt. La figure 1.7 illustre à travers quelques exemples la grande variété d'émetteurs qui a été étudiée.

En particulier, la découverte des nanotubes de carbone dans les années 1990 [54] a accru l'intérêt porté aux technologies d'émission par effet de champ. Présentant naturellement un fort facteur d'aspect, une grande stabilité chimique, de très bonnes propriétés mécaniques et thermiques, et une conductivité électrique correcte, les nanotubes de carbones ont rapidement été identifiés comme

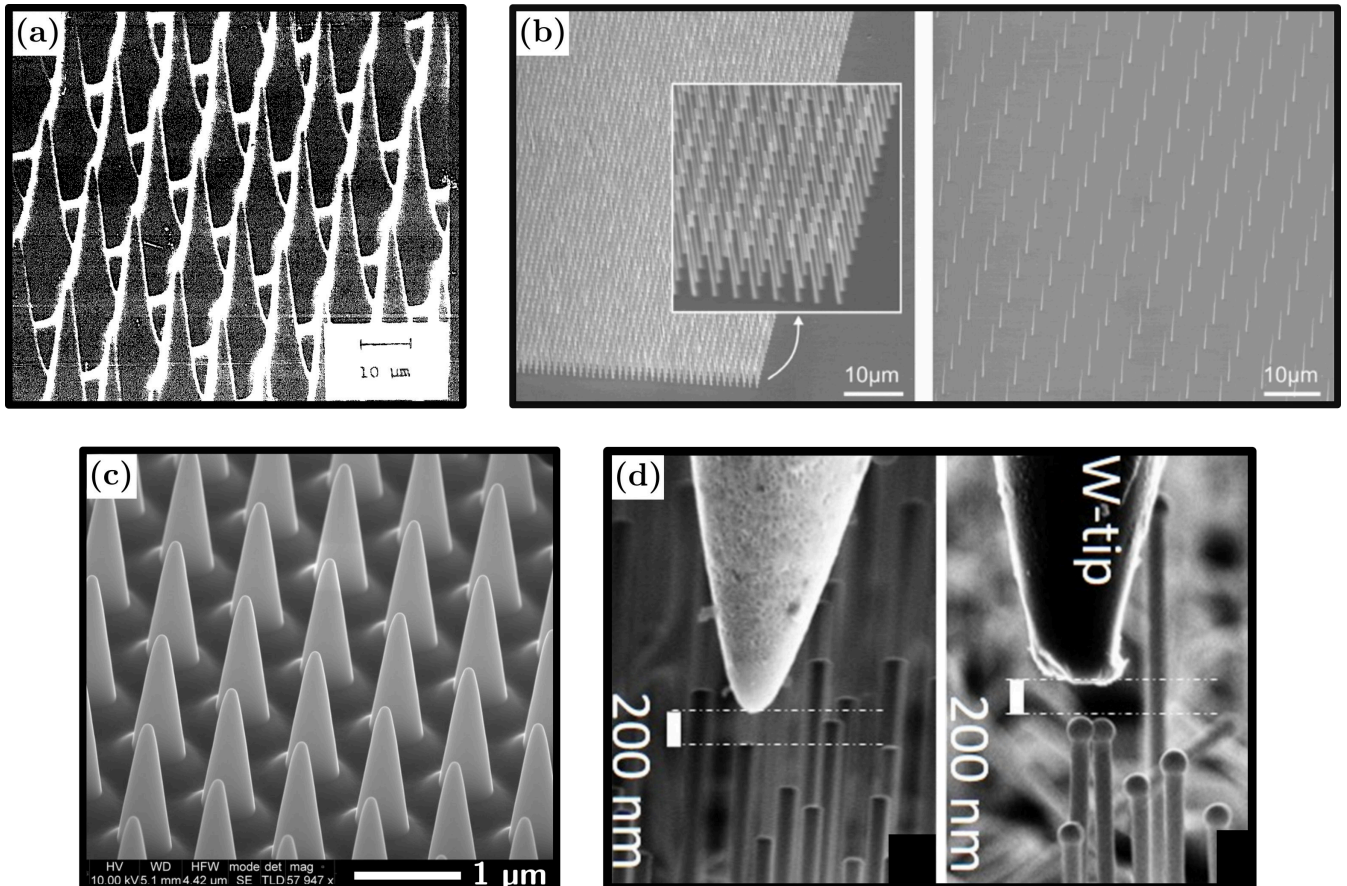


FIGURE 1.7 – Images au microscope électronique de différents arrangements d'émetteurs conçus pour le design de sources d'électrons type FEA. **(a)** : microfabrication d'un réseau d'émetteur en tungstène [49] (*in ref.* Fig. 7). **(b)** : Réseaux de nanostructures de carbone crues par dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma – PECVD pour *Plasma Enhanced Vapor Deposition* en anglais – [50] (*in ref.* Fig. 1). **(c)** : Réseau d'émetteur en carbure de silicium (Si-C) nano-usiné par faisceau d'ions focalisés – *Focused Ion Beam milling* en anglais. L'image a été capturée par Alexey Kolomiytsev à l'aide d'un appareil Nova DualBeam de chez ThermoFisher Scientific [51]. **(d)** : Réseau de nanofils d'arséniure de gallium (GaAs) crus par épitaxie par jet moléculaire – MBE pour *molecular beam epitaxy* en anglais. La croissance est auto catalysée à partir d'un dépôt de gallium. Les deux images côte à côte montrent les nanofils sans et avec la goutte initiale de gallium [52] (*in ref.* Fig. 1).

bons candidats pour l'émission électronique [55]. Au cours des trois dernières décennies, de nombreux travaux ont envisagé la possibilité que des sources FEA basées sur des nanostructures de carbone puissent remplacer les sources thermoioniques dans les tubes à vide pour diverses applications :

- la fabrication d'écran FED pour *Field Emission Display* en anglais [56, 57]. Cette technologie était censée offrir une alternative moins encombrante et moins consommatrice d'énergie aux tubes cathodiques à sources thermoioniques. Leur commercialisation a cependant été ralentie par la difficulté à produire de manière fiable et reproductible des réseaux d'émetteurs à effet de champ, et l'arrivée des technologies à cristaux liquides (LCD pour *Liquid Crystal Display* en anglais) a mis un terme au développement des FEDs.
- la fabrication de source à rayon X. Malgré un courant total encore souvent inférieur aux cathodes chaudes, les nanoémetteurs en carbone ont notamment permis la conception de sources de rayon X miniaturisées [58] qui pourraient être utilisées à moindre coût pour l'imagerie biologique à petite échelle ou le traitement localisé de cancers par radiation. Ce champ d'application est aujourd'hui toujours en développement [59].
- l'amélioration des télécommunications via l'amplification hyperfréquence dans des tubes à ondes [35]. Le remplacement des sources thermoioniques serait particulièrement bénéfique pour les applications spatiales (tubes pour lesquelles une réduction de l'encombrement et de la consommation énergétique est essentielle [60]).

Notons par ailleurs que ces travaux ont globalement exploré l'émission depuis deux types de "réseau" bien distinct : d'un côté des pelotes de filaments de carbone très entremêlés [61] et de l'autre une organisation régulière plus ou moins dense de nanostructure bien verticale et dont on essaie de contrôler au mieux la géométrie [62, 63]. Si le premier type présente l'avantage d'une grande facilité de fabrication avec une bonne occurrence statistique de quelques sites très émissifs, le second type permet un meilleur contrôle et une étude plus fine de l'émission, offrant des pistes d'optimisation plus convaincante. La combinaison des avantages des deux types d'arrangements a aussi été envisagée dans certaines études, comme l'utilisation d'un réseau régulier de pelote de filaments [64] ou un réseau régulier de nanofibres micrométriques de carbone présentant à leur sommet une ramification en nanostructures [65] mais ces pistes empruntent dans le même temps une partie des inconvénients des deux types.

Mentionnons enfin la recherche active de nouveaux types d'émetteurs plus performants au cours de la dernière décennie. L'avancée continue des techniques de gravure ont mené à l'étude d'une plus large catégorie de nanostructures, qu'illustre bien la série d'études expérimentales menées par Giubileo *et al.*, explorant successivement des nanofils d'arséniure de gallium [52], des nanofleurs de bisulfure de molybdène (donnant une structure similaire à celle des roses des sables) [66] ou encore des nanofils d'indium antimoine [67]. Ces explorations récentes n'ont toutefois pas encore dépassé le stade de la recherche appliquée.

### 1.3 Émission électronique par effet de champ et claquage électrique sous vide

En parallèle des développements technologiques autour des sources d'électrons, l'autre domaine majeur qui motive l'étude de l'émission électronique par effet de champ est la tenue aux hautes tensions sous vide. Pour de nombreux appareils modernes fonctionnant à très basse pression, comme les accélérateurs de particules ou les injecteurs de neutre pour les machines à fusion, une très haute tension est nécessaire. Les champs atteints à la surface des parties métalliques peuvent ainsi aisément atteindre les centaines de MV/m. Un renforcement de champ d'un facteur de quelques dizaines suffit alors à émettre des électrons par effet de champ. Ce renforcement de champ provient généralement d'aspérités naturellement présentes à la surface d'une électrode insuffisamment polie, ou qui se sont formées à la suite d'un choc, d'une rayure ou d'un précédent claquage électrique. La figure 1.8 donne quelques exemples d'observation de ces aspérités.

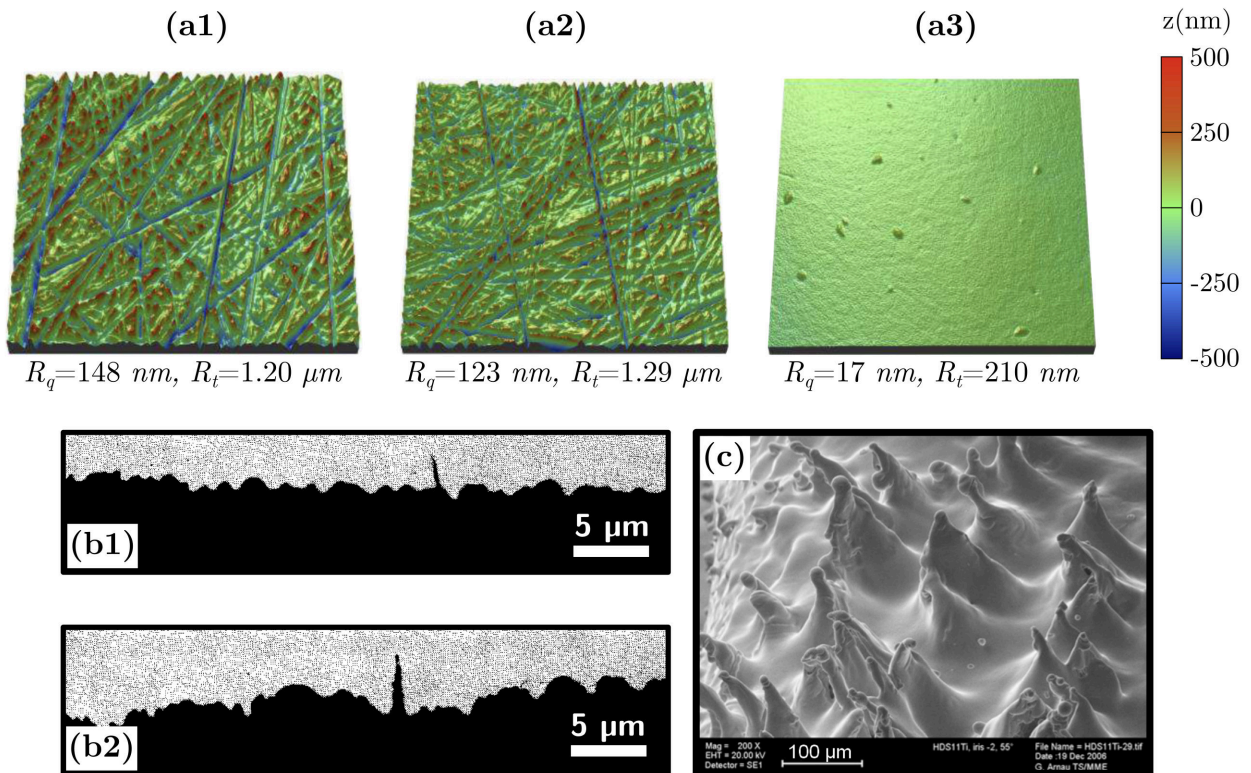


FIGURE 1.8 – Exemples de rugosités de surface pouvant être la cause d'un claquage sous vide initié par une émission d'électrons par effet de champ. **(a)** : Images au profilomètre 3D de l'état de surface d'une électrode en inox 316L après différent traitement. La surface scannée mesure  $124 \times 94\text{ }\mu\text{m}^2$ .  $R_q$  est l'écart moyen quadratique et  $R_t$  est la hauteur maximale du profil. **(a1)** : Polissage au papier de silice jusqu'à une taille de grains de  $35\text{ }\mu\text{m}$ . **(a2)** : Polissage au papier de silice jusqu'à une taille de grains de  $21.8\text{ }\mu\text{m}$ . **(a3)** Polissage au papier de silice jusqu'à une taille de grains de  $15.3\text{ }\mu\text{m}$  suivi par un polissage au diamant avec une taille de particule de l'ordre du micromètre. Les images proviennent de la thèse de K. Almaksour [68]. **(b)** : observation par microscopie électronique de sites émissifs au niveau de rayures macroscopiques visibles sur la cathode, faite d'acier inoxydable dans le premier cas et d'aluminium dans le second. Les deux images proviennent de la figure 4 de l'article de Little et Whitney de 1963 [69]. L'échelle donnée est approximative. Dans les deux cas, une protrusion dominante ressort de l'observation, d'une taille typique de l'ordre de quelques microns et d'un facteur d'aspect  $f = H/R$  d'environ cinq [69] (*in ref.* Sec. C, §1). **(c)** : état de surface d'une cavité accélératrice en titane observé au collisionneur linéaire compact du CERN. L'image provient de la figure 9 de l'article de Antoine *et al.* [70]. Les aspérités sont supposées avoir été formées par électromigration en présence d'un plasma, sous des champs RF de l'ordre de la centaine de MV/m (*in ref.* sous-sec. 3.2.3, §2 et 3).

Lorsque le champ est suffisamment fort, on peut observer une émission électronique depuis le sommet des aspérités les plus profilées. On parle alors de décharge électrique sous vide. Si l'émission est suffisamment intense, et dépendamment de sa géométrie et de ses propriétés matériaux, l'autoéchauffement de l'aspérité peut l'emporter sur l'évacuation thermique et la température risque de monter jusqu'à atteindre le point de fusion. De la vapeur peut alors être libérée depuis le sommet de l'émetteur, là où la température est généralement maximale. Cette vapeur est ensuite ionisée par les électrons émis ce qui risque d'allumer un arc électrique entre les deux électrodes, provoquant un claquage [71]. Il est à noter qu'une éjection de matière peut alors avoir lieu depuis le pied d'arc, menant à la formation de nouveaux sites émissifs [72].

Ce mécanisme peut d'ailleurs être facilité par une rétroaction positive supplémentaire : la diffusion de surface des atomes au niveau de la zone d'émission peut accroître le renforcement géométrique du champ et favoriser plus avant l'émission et donc l'autoéchauffement [73]. D'un point de vue mécanique, les champs électriques élevés peuvent en effet produire de fortes contraintes de traction électrostatique sur les surfaces. On parle en anglais de *field-enhanced surface atom diffusion*. Avec des champs dépassant la dizaine de gigavolts par mètre, ces contraintes peuvent même dépasser la limite d'élasticité du matériau (*yield strength* en anglais), menant à une légère évaporation ou une déformation de l'émetteur [74]. Ce phénomène est généralement pris en compte dans la modélisation d'émetteurs nanométriques soumis à des champs électriques oscillants aux radiofréquences (RF), permettant d'atteindre les amplitudes suffisantes [73, 75]. Il faut toutefois noter qu'une forte température est généralement requise en plus d'un fort champ électrique [76]. En effet, une température plus élevée augmente la probabilité de diffusion d'un atome (équation d'Arrhenius) et réduit la limite d'élasticité<sup>4</sup>.

Lorsque l'autoéchauffement mène à un effet Nottingham fortement refroidissant (*i.e.* l'énergie moyenne des électrons émis est supérieure à celle des électrons de remplacement), il est possible que la température maximum soit atteinte en volume et non au sommet. Dans ce cas, les mécanismes décrits au paragraphe précédent risquent ici de mener à l'explosion de l'émetteur. C'est par exemple le scénario avancé pour interpréter les observations expérimentales rapporté par Wei *et al.* [78] sur l'explosion d'un nanotube de carbone émetteur. Ce scénario a également été envisagé pour des émetteurs métalliques micrométriques [79, 80]. Dans ce cas aussi, l'explosion de l'émetteur mène à la formation d'un plasma à la cathode, risquant de provoquer un claquage électrique.

Mentionnons aussi la possibilité d'une fracture de l'émetteur due à des contraintes thermiques trop importantes reliées à de forts gradients de température. Bien que ces contraintes se trouvent être trop faibles dans la configuration décrite par Ancona [74] (*in ref.* sec. IV), Dmitriev avait suggéré plus tôt [81] que de telles fractures pourraient avoir lieu au cours de l'autoéchauffement d'émetteurs cylindrique à très fort facteur d'aspect (*whisker* en anglais) et précéder une autrement possible évaporation ou explosion des émetteurs.

Un dernier scénario concerne la dynamique de particules résiduelles pouvant être relâchées dans l'enceinte sous vide. L'origine de ces particules de taille micrométrique a beaucoup été discutée dans la littérature. L'hypothèse qui semble la plus probable est que ces microparticules proviennent en fait de l'anode [82] : Sous l'émission d'un fort courant émis par la cathode, l'anode est localement chauffée ce qui réduit la limite d'élasticité du matériau. Lorsque celle-ci est abaissée jusqu'à la contrainte électrostatique ressentie à l'anode, le détachement de microparticules positivement chargées devient possible [83]. Au cours de leur transit vers la cathode, ces particules subissent le même bombardement électronique qui a causé l'échauffement initial à l'anode. Si ce bombardement est suffisant pour chauffer plus avant les particules, et enclencher leur évaporation, l'ionisation de la vapeur résultante peut *in fine* permettre le développement d'un claquage électrique par avalanche électronique [84]. Ce scénario, initialement proposé par Cranberg en 1952 [85], a été approfondi depuis [83, 86, 87, 84]

---

4. Dans le cas du molybdène, la limite d'élasticité est par exemple divisée par 3 lorsque la température passe de 1550 K à 2200 K [77] (*in ref.* Fig. 3)



et pourrait être la cause de certains claquages électriques, dépendant dans ce cas des caractéristiques de l'anode.

Comme nous allons le voir dans le prochain chapitre, la plupart des phénomènes physiques impliqués dans ces scénarios dépassent les équations de notre modèle, qui se limite essentiellement à la partie autoéchauffement de l'émetteur. Tous ces scénarios ont en revanche comme prérequis commun une très forte élévation de la température, et plus spécifiquement le dépassement de la température de fusion pour la majorité. Nous nous limiterons donc à prendre ce critère comme condition de préclaquage, sans chercher à distinguer précisément le type de scénario qui en découlera.

## Références du chapitre 1

« *Those who cannot remember the past are condemned to repeat it.* »

– George Santayana  
(*The life of Reason*, 1980)

- [1] C. KLEINT. « On the Early History of Field Emission Including Attempts of Tunneling Spectroscopy ». en. In : *Progress in Surface Science* 42.1-4 (jan. 1993), p. 101-115. ISSN : 00796816. DOI : [10.1016/0079-6816\(93\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0079-6816(93)90064-3) (cf. p. 10, 14).
- [2] J. H. WINKLER. *Gedanken von den Eigenschaften, Wirkungen und Ursachen der Electricität*. Altemand. Leipzig, 1744 (cf. p. 10).
- [3] Donald M. MATTOX. « Early Vacuum Science and Technology ». en. In : *The Foundations of Vacuum Coating Technology*. Sous la dir. de Donald M. MATTOX. Berlin, Heidelberg : Springer, 2003, p. 2-4. ISBN : 978-3-662-10329-6. DOI : [10.1007/978-3-662-10329-6\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-662-10329-6_2) (cf. p. 10).
- [4] Richard G. FORBES. « Use of Millikan–Lauritsen Plots, Rather than Fowler–Nordheim Plots, to Analyze Field Emission Current–Voltage Data ». en. In : *Journal of Applied Physics* 105.11 (juin 2009), p. 114313. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.3140602](https://doi.org/10.1063/1.3140602) (cf. p. 10).
- [5] R. W. WOOD. « A New Form of Cathode Discharge and the Production of X -Rays, Together with Some Notes on Diffraction. Preliminary Communication ». en. In : *Physical Review (Series I)* 5.1 (juill. 1897), p. 1-10. ISSN : 1536-6065. DOI : [10.1103/PhysRevSeriesI.5.1](https://doi.org/10.1103/PhysRevSeriesI.5.1) (cf. p. 11).
- [6] Isobel FALCONER. « Corpuscles, Electrons and Cathode Rays : J. J. Thomson and the 'Discovery of the Electron' ». In : *The British Journal for the History of Science* 20.3 (1987), p. 241-276. ISSN : 0007-0874 (cf. p. 11).
- [7] J. J. THOMSON. « Cathode Rays ». en. In : *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 44.269 (oct. 1897), p. 293-316. ISSN : 1941-5982, 1941-5990. DOI : [10.1080/14786449708621070](https://doi.org/10.1080/14786449708621070) (cf. p. 11).
- [8] O. W. RICHARDSON. *The Emission of Electricity from Hot Bodies*. en-GB. Longmans. London, 1916 (cf. p. 11).
- [9] Owen Willians RICHARDSON. *Thermionic Phenomena and the Laws Which Govern Them*. en-US. <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1928/richardson/lecture/>. 1929 (cf. p. 11).
- [10] « Émission thermoionique ». fr. In : *Wikipédia* (fév. 2021) (cf. p. 11).
- [11] Albert EINSTEIN. « Über einem die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt ». de. In : *Annalen der Physik* vol. 4, t. 17 (1905) (cf. p. 11).
- [12] A. B. ARONS et M. B. PEPPARD. « Einstein's Proposal of the Photon Concept—a Translation of the Annalen Der Physik Paper of 1905 ». In : *American Journal of Physics* 33.5 (mai 1965), p. 367-374. ISSN : 0002-9505. DOI : [10.1119/1.1971542](https://doi.org/10.1119/1.1971542) (cf. p. 11).
- [13] H. HERTZ. « Ueber einen Einfluss des ultravioletten Lichtes auf die electrische Entladung ». de. In : *Annalen der Physik und Chemie* 267.8 (1887), p. 983-1000. ISSN : 00033804, 15213889. DOI : [10.1002/andp.18872670827](https://doi.org/10.1002/andp.18872670827) (cf. p. 11).

- [14] J. E. LILIENTHAL. « Die Elektrizitätsleitung im extremen Vakuum ». de. In : *Annalen der Physik* 337.9 (1910), p. 673-738. ISSN : 00033804, 15213889. DOI : [10.1002/andp.19103370902](https://doi.org/10.1002/andp.19103370902) (cf. p. 11).
- [15] J. E. LILIENTHAL. « Zur Hochvakuumladung ». de. In : *Annalen der Physik* 366.3 (1920), p. 221-263. ISSN : 00033804, 15213889. DOI : [10.1002/andp.19203660302](https://doi.org/10.1002/andp.19203660302) (cf. p. 11).
- [16] R. A. MILLIKAN et Carl F. EYRING. « Laws Governing the Pulling of Electrons out of Metals by Intense Electrical Fields ». en. In : *Physical Review* 27.1 (jan. 1926), p. 51-67. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.27.51](https://doi.org/10.1103/PhysRev.27.51) (cf. p. 11, 12).
- [17] Robert A. MILLIKAN et Charles C. LAURITSEN. « Dependence of Electron Emission from Metals Upon Field Strengths and Temperatures ». en. In : *Physical Review* 33.4 (avr. 1929), p. 598-604. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.33.598](https://doi.org/10.1103/PhysRev.33.598) (cf. p. 11).
- [18] Ralph Howard FOWLER et L. NORDHEIM. « Electron Emission in Intense Electric Fields ». en. In : *Proc. R. Soc. Lond. A* 119.781 (mai 1928), p. 173-181. ISSN : 0950-1207, 2053-9150. DOI : [10.1098/rspa.1928.0091](https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0091) (cf. p. 12, 13).
- [19] Joseph E. HENDERSON et R. K. DAHLSTROM. « The Energy Distribution in Field Emission ». en. In : *Physical Review* 55.5 (mars 1939), p. 473-481. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.55.473](https://doi.org/10.1103/PhysRev.55.473) (cf. p. 12, 13).
- [20] L. W. NORDHEIM. « The Effect of the Image Force on the Emission and Reflexion of Electrons by Metals ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 121.788 (1928), p. 626-639. ISSN : 0950-1207 (cf. p. 12).
- [21] R. E. BURGESS, H. KROEMER et J. M. HOUSTON. « Corrected Values of Fowler-Nordheim Field Emission Functions  $\psi(y)$  and  $\phi(y)$  ». In : *Physical Review* 90.4 (mai 1953), p. 515-515. DOI : [10.1103/PhysRev.90.515](https://doi.org/10.1103/PhysRev.90.515) (cf. p. 12).
- [22] S. C. MILLER et R. H. GOOD. « A WKB-Type Approximation to the Schrödinger Equation ». In : *Physical Review* 91.1 (juill. 1953), p. 174-179. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.91.174](https://doi.org/10.1103/PhysRev.91.174) (cf. p. 13).
- [23] E. L. MURPHY et R. H. GOOD. « Thermionic Emission, Field Emission, and the Transition Region ». In : *Physical Review* 102.6 (juin 1956), p. 1464-1473. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.102.1464](https://doi.org/10.1103/PhysRev.102.1464) (cf. p. 13).
- [24] G. M. FLEMING et Joseph E. HENDERSON. « The Energy Losses Attending Field Current and Thermionic Emission of Electrons from Metals ». In : *Physical Review* 58.10 (nov. 1940), p. 887-894. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.58.887](https://doi.org/10.1103/PhysRev.58.887) (cf. p. 13).
- [25] W. B. NOTTINGHAM. « Remarks on Energy Losses Attending Thermionic Emission of Electrons from Metals ». In : *Physical Review* 59.11 (juin 1941), p. 906-907. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.59.906.2](https://doi.org/10.1103/PhysRev.59.906.2) (cf. p. 14).
- [26] Paul H. LEVINE. « Thermoelectric Phenomena Associated with Electron-Field Emission ». In : *Journal of Applied Physics* 33.2 (fév. 1962), p. 582-587. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.1702470](https://doi.org/10.1063/1.1702470) (cf. p. 14).
- [27] F. M. CHARBONNIER et al. « Nottingham Effect in Field and T - F Emission : Heating and Cooling Domains, and Inversion Temperature ». In : *Physical Review Letters* 13.13 (sept. 1964), p. 397-401. ISSN : 0031-9007. DOI : [10.1103/PhysRevLett.13.397](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.13.397) (cf. p. 14).
- [28] L. W. SWANSON, L. C. CROUSER et F. M. CHARBONNIER. « Energy Exchanges Attending Field Electron Emission ». In : *Physical Review* 151.1 (nov. 1966), p. 327-340. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.151.327](https://doi.org/10.1103/PhysRev.151.327) (cf. p. 14).
- [29] Luis H. TOLEDO-PEREYRA. « X-Rays Surgical Revolution ». In : *Journal of Investigative Surgery* 22.5 (jan. 2009), p. 327-332. ISSN : 0894-1939. DOI : [10.1080/08941930903300054](https://doi.org/10.1080/08941930903300054) (cf. p. 14).

- [30] Massimo GUARNIERI. « The Age of Vacuum Tubes : Early Devices and the Rise of Radio Communications [Historical] ». In : *IEEE Industrial Electronics Magazine* 6.1 (mars 2012), p. 41-43. ISSN : 1941-0115. DOI : [10.1109/MIE.2012.2182822](https://doi.org/10.1109/MIE.2012.2182822) (cf. p. 14).
- [31] Massimo GUARNIERI. « The Age of Vacuum Tubes : The Conquest of Analog Communications [Historical] ». In : *IEEE Industrial Electronics Magazine* 6.2 (juin 2012), p. 52-54. ISSN : 1941-0115. DOI : [10.1109/MIE.2012.2193274](https://doi.org/10.1109/MIE.2012.2193274) (cf. p. 14).
- [32] Massimo GUARNIERI. « The Age of Vacuum Tubes : Merging with Digital Computing [Historical] ». In : *IEEE Industrial Electronics Magazine* 6.3 (sept. 2012), p. 52-55. ISSN : 1941-0115. DOI : [10.1109/MIE.2012.2207830](https://doi.org/10.1109/MIE.2012.2207830) (cf. p. 14).
- [33] Tom LEWIS. *Empire of the Air : The Men Who Made Radio*. HarperCollins, 1991. ISBN : 978-0-060-18215-1 (cf. p. 15).
- [34] Juliette PLOUIN. « Injection d'harmonique Dans Un Tube à Ondes Progressives : Amélioration de La Puissance de Sortie ». Thèse de doct. Ecole Polytechnique, juin 2004 (cf. p. 16).
- [35] Eric MINOUX. « Sources électroniques à base de nanotubes de carbone - Application aux tubes amplificateurs hyperfréquence. » fr. Thèse de doct. Ecole Polytechnique X, avr. 2006. URL : <https://pastel.archives-ouvertes.fr/pastel-00001904/document> (visité le 22/08/2018) (cf. p. 16, 21).
- [36] Richard P FEYNMAN, Robert B LEIGHTON et Matthew L SANDS. *The Feynman Lectures on Physics. Volume II, Volume II*, en. 2010. ISBN : 978-0-465-07998-8 978-0-465-07297-2 978-0-465-07399-3 (cf. p. 17).
- [37] Erwin W. MÜLLER. « Elektronenmikroskopische Beobachtungen von Feldkathoden ». de. In : *Zeitschrift für Physik* 106.9 (sept. 1937), p. 541-550. ISSN : 0044-3328. DOI : [10.1007/BF01339895](https://doi.org/10.1007/BF01339895) (cf. p. 16).
- [38] L. W. SWANSON et G. A. SCHWIND. « Chapter 2 A Review of the Cold-Field Electron Cathode ». en. In : *Advances in Imaging and Electron Physics*. T. 159. Advances in Imaging and Electron Physics. Elsevier, jan. 2009, p. 63-100. DOI : [10.1016/S1076-5670\(09\)59002-7](https://doi.org/10.1016/S1076-5670(09)59002-7). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1076567009590027> (visité le 05/12/2020) (cf. p. 18).
- [39] Allan J. MELMED. « The art and science and other aspects of making sharp tips ». en. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 9.2 (mars 1991), p. 601. ISSN : 0734211X. DOI : [10.1116/1.585467](https://doi.org/10.1116/1.585467). URL : <http://scitation.aip.org/content/avs/journal/jvstb/9/2/10.1116/1.585467> (visité le 31/10/2021) (cf. p. 17).
- [40] A.-D. MÜLLER et al. « Characterization of Electrochemically Etched Tungsten Tips for Scanning Tunneling Microscopy ». en. In : *Review of Scientific Instruments* 70.10 (oct. 1999), p. 3970-3972. ISSN : 0034-6748, 1089-7623. DOI : [10.1063/1.1150022](https://doi.org/10.1063/1.1150022) (cf. p. 17).
- [41] Erwin W. MÜLLER. « Das Feldionenmikroskop ». de. In : *Zeitschrift für Physik* 131.1 (mars 1951), p. 136-142. ISSN : 1434-6001, 1434-601X. DOI : [10.1007/BF01329651](https://doi.org/10.1007/BF01329651) (cf. p. 18).
- [42] L. W. SWANSON et A. E. BELL. « Recent Advances in Field Electron Microscopy of Metals ». en. In : *Advances in Electronics and Electron Physics*. Sous la dir. de L. MARTON et Claire MARTON. T. 32. Academic Press, jan. 1973, p. 193-309. DOI : [10.1016/S0065-2539\(08\)60236-X](https://doi.org/10.1016/S0065-2539(08)60236-X) (cf. p. 18).
- [43] G. EHRLICH et F. G. HUDDA. « Atomic View of Surface Self-Diffusion : Tungsten on Tungsten ». en. In : *The Journal of Chemical Physics* 44.3 (fév. 1966), p. 1039-1049. ISSN : 0021-9606, 1089-7690. DOI : [10.1063/1.1726787](https://doi.org/10.1063/1.1726787) (cf. p. 18).
- [44] D. Phil WOODRUFF. *Modern Techniques of Surface Science*. Third. Cambridge : Cambridge University Press, 2016. ISBN : 978-1-107-02310-9. DOI : [10.1017/CB09781139149716](https://doi.org/10.1017/CB09781139149716) (cf. p. 18).
- [45] A. V. CREWE, J. WALL et L. M. WELTER. « A High-Resolution Scanning Transmission Electron Microscope ». In : *Journal of Applied Physics* 39.13 (déc. 1968), p. 5861-5868. ISSN : 0021-8979. DOI : [10.1063/1.1656079](https://doi.org/10.1063/1.1656079) (cf. p. 18).

- [46] Nicolas BRODUSCH, Hendrix DEMERS et Raynald GAUVIN. *Field Emission Scanning Electron Microscopy*. SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology. Singapore : Springer Singapore, 2018. ISBN : 978-981-10-4432-8 978-981-10-4433-5. DOI : [10.1007/978-981-10-4433-5](https://doi.org/10.1007/978-981-10-4433-5) (cf. p. 18).
- [47] I. BRODIE et C. A. SPINDT. « The application of thin-film field-emission cathodes to electronic tubes ». en. In : *Applications of Surface Science* 2.2 (jan. 1979), p. 149-163. ISSN : 0378-5963. DOI : [10.1016/0378-5963\(79\)90031-X](https://doi.org/10.1016/0378-5963(79)90031-X). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037859637990031X> (visité le 20/07/2021) (cf. p. 19).
- [48] C. A. SPINDT et al. « Physical properties of thin-film field emission cathodes with molybdenum cones ». In : *Journal of Applied Physics* 47.12 (déc. 1976), p. 5248-5263. ISSN : 0021-8979. DOI : [10.1063/1.322600](https://doi.org/10.1063/1.322600). URL : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.322600> (visité le 22/08/2018) (cf. p. 19).
- [49] C.A. SPINDT. « Microfabricated field-emission and field-ionization sources ». en. In : *Surface Science* 266.1-3 (avr. 1992), p. 145-154. ISSN : 00396028. DOI : [10.1016/0039-6028\(92\)91012-Z](https://doi.org/10.1016/0039-6028(92)91012-Z). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/003960289291012Z> (visité le 27/04/2020) (cf. p. 20).
- [50] Matthew T. COLE et al. « Deterministic Cold Cathode Electron Emission from Carbon Nanofibre Arrays ». en. In : *Scientific Reports* 4.1 (mai 2014). Number : 1 Publisher : Nature Publishing Group, p. 4840. ISSN : 2045-2322. DOI : [10.1038/srep04840](https://doi.org/10.1038/srep04840). URL : <https://www.nature.com/articles/srep04840> (visité le 05/01/2021) (cf. p. 20).
- [51] Mark ANDERSON. *Field Electron Emission Elements*. en-US. Mars 2015. URL : <https://www.fei.com/image-gallery/Field-Electron-Emission/#gsc.tab=0> (visité le 04/10/2021) (cf. p. 20).
- [52] Filippo GIUBILEO et al. « Field Emission from Self-Catalyzed GaAs Nanowires ». en. In : *Nanomaterials* 7.9 (sept. 2017), p. 275. ISSN : 2079-4991. DOI : [10.3390/nano7090275](https://doi.org/10.3390/nano7090275). URL : <http://www.mdpi.com/2079-4991/7/9/275> (visité le 25/03/2021) (cf. p. 20, 21).
- [53] Erich J. RADAUSCHER et al. « Improved Performance of Field Emission Vacuum Microelectronic Devices for Integrated Circuits ». In : *IEEE Transactions on Electron Devices* 63.9 (sept. 2016), p. 3753-3760. ISSN : 0018-9383, 1557-9646. DOI : [10.1109/TED.2016.2593905](https://doi.org/10.1109/TED.2016.2593905) (cf. p. 19).
- [54] Sumio IIJIMA. « Helical microtubules of graphitic carbon ». en. In : *Nature* 354.6348 (nov. 1991). Bandiera\_abtest : a Cg\_type : Nature Research Journals Number : 6348 Primary\_atype : Research Publisher : Nature Publishing Group, p. 56-58. ISSN : 1476-4687. DOI : [10.1038/354056a0](https://doi.org/10.1038/354056a0). URL : <https://www.nature.com/articles/354056a0> (visité le 04/11/2021) (cf. p. 19).
- [55] Filippo GIUBILEO et al. « Field Emission from Carbon Nanostructures ». en. In : *Applied Sciences* 8.4 (mars 2018), p. 526. ISSN : 2076-3417. DOI : [10.3390/app8040526](https://doi.org/10.3390/app8040526). URL : <http://www.mdpi.com/2076-3417/8/4/526> (visité le 05/04/2020) (cf. p. 21).
- [56] Yoshikazu NAKAYAMA et Seiji AKITA. « Field-emission device with carbon nanotubes for a  $\bar{\gamma}$  at panel display ». en. In : *Synthetic Metals* (2001), p. 4 (cf. p. 21).
- [57] Q. H. WANG, M. YAN et R. P. H. CHANG. « Flat panel display prototype using gated carbon nanotube field emitters ». en. In : *Applied Physics Letters* 78.9 (fév. 2001), p. 1294-1296. ISSN : 0003-6951, 1077-3118. DOI : [10.1063/1.1351847](https://doi.org/10.1063/1.1351847). URL : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1351847> (visité le 15/06/2020) (cf. p. 21).
- [58] Jin-Woo JEONG et al. « A digital miniature x-ray tube with a high-density triode carbon nanotube field emitter ». en. In : *Applied Physics Letters* 102.2 (jan. 2013), p. 023504. ISSN : 0003-6951, 1077-3118. DOI : [10.1063/1.4776222](https://doi.org/10.1063/1.4776222). URL : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4776222> (visité le 15/06/2020) (cf. p. 21).
- [59] Yunhan LI. « Carbon Nanotube Field Emitter Array and Its Application to Novel X-Ray Systems ». Thèse de doct. Juin 2018 (cf. p. 21).

- [60] W. I. MILNE et al. « Aligned Carbon Nanotubes/Fibers for Applications in Vacuum Microwave Amplifiers ». In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 24.1 (2006), p. 345. ISSN : 10711023. DOI : [10.1116/1.2161223](https://doi.org/10.1116/1.2161223) (cf. p. 21).
- [61] W. A. de HEER, A. CH TELAIN et D. UGARTE. « A Carbon Nanotube Field-Emission Electron Source ». en. In : *Science* 270.5239 (nov. 1995), p. 1179-1180. ISSN : 0036-8075, 1095-9203. DOI : [10.1126/science.270.5239.1179](https://doi.org/10.1126/science.270.5239.1179). URL : <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.270.5239.1179> (visité le 22/08/2018) (cf. p. 21).
- [62] Z. F. REN et al. « Synthesis of Large Arrays of Well-Aligned Carbon Nanotubes on Glass ». en. In : *Science* 282.5391 (nov. 1998), p. 1105-1107. ISSN : 0036-8075, 1095-9203. DOI : [10.1126/science.282.5391.1105](https://doi.org/10.1126/science.282.5391.1105). URL : <https://www.science.org/doi/10.1126/science.282.5391.1105> (visité le 04/11/2021) (cf. p. 21).
- [63] Yonghai SUN, John T. W. YEOW et David A. JAFFRAY. « Design and Fabrication of Carbon Nanotube Field-Emission Cathode with Coaxial Gate and Ballast Resistor ». en. In : *Small* 9.20 (oct. 2013), p. 3385-3389. ISSN : 16136810. DOI : [10.1002/smll.201300553](https://doi.org/10.1002/smll.201300553). URL : <http://doi.wiley.com/10.1002/smll.201300553> (visité le 26/03/2021) (cf. p. 21).
- [64] V. KATO, T. CHOUHAN et S. NOGUCHI. « Field emission from optimized structure of carbon nanotube field emitter array ». en. In : *J. Appl. Phys.* (2016), p. 9 (cf. p. 21).
- [65] M. CAHAY et al. « Optimizing the Field Emission Properties of Carbon-Nanotube-Based Fibers ». en. In : *Nanotube Superfiber Materials*. Elsevier, 2019, p. 511-539. ISBN : 978-0-12-812667-7. DOI : [10.1016/B978-0-12-812667-7.00021-5](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812667-7.00021-5). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128126677000215> (visité le 20/08/2019) (cf. p. 21).
- [66] Filippo GIUBILEO et al. « Field Emission Characterization of MoS<sub>2</sub> Nanoflowers ». In : *Nanomaterials* 9.5 (mai 2019), p. 717. ISSN : 2079-4991. DOI : [10.3390/nano9050717](https://doi.org/10.3390/nano9050717) (cf. p. 21).
- [67] Filippo GIUBILEO et al. « Field Emission Characteristics of InSb Patterned Nanowires ». en. In : (2020), p. 9 (cf. p. 21).
- [68] Khaled Almousa ALMAKSOUR. « Étude de l'émission cathodique sous vide en présence d'un champ électrique intense et des paramètres physiques gouvernant son intensité ». fr. Thèse de doct. Paris : Université Paris Sud - Paris XI, jan. 2014. URL : <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01014658/document> (cf. p. 22).
- [69] R. P. LITTLE et W. T. WHITNEY. « Electron Emission Preceding Electrical Breakdown in Vacuum ». In : *Journal of Applied Physics* 34.8 (août 1963). Publisher : American Institute of Physics, p. 2430-2432. ISSN : 0021-8979. DOI : [10.1063/1.1702760](https://doi.org/10.1063/1.1702760). URL : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1702760> (visité le 27/05/2021) (cf. p. 22).
- [70] C. Z. ANTOINE, F. PEAUGER et F. LE PIMPEC. « Erratum to : Electromigration occurrences and its effects on metallic surfaces submitted to high electromagnetic field : A novel approach to breakdown in accelerators ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 670 (avr. 2012), p. 79-94. ISSN : 0168-9002. DOI : [10.1016/j.nima.2012.01.027](https://doi.org/10.1016/j.nima.2012.01.027). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900212000678> (visité le 27/07/2018) (cf. p. 22).
- [71] G. E. VIBRANS. « Vacuum Voltage Breakdown as a Thermal Instability of the Emitting Protrusion ». In : *Journal of Applied Physics* 35.10 (1964), p. 4. DOI : [10.1063/1.1713118](https://doi.org/10.1063/1.1713118) (cf. p. 23).
- [72] H. T. C. KAUFMANN et al. « Detailed Numerical Simulation of Cathode Spots in Vacuum Arcs : Interplay of Different Mechanisms and Ejection of Droplets ». In : *Journal of Applied Physics* 122.16 (oct. 2017), p. 163303. ISSN : 0021-8979. DOI : [10.1063/1.4995368](https://doi.org/10.1063/1.4995368) (cf. p. 23).
- [73] A. KYRITSAKIS et al. « Thermal Runaway of Metal Nano-Tips during Intense Electron Emission ». In : *Journal of Physics D : Applied Physics* 51.22 (juin 2018), p. 225203. ISSN : 0022-3727, 1361-6463. DOI : [10.1088/1361-6463/aac03b](https://doi.org/10.1088/1361-6463/aac03b) (cf. p. 23).

- [74] M. G. ANCONA. « Thermomechanical Analysis of Failure of Metal Field Emitters ». In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 13.6 (nov. 1995), p. 2206. ISSN : 0734211X. DOI : [10.1116/1.588105](https://doi.org/10.1116/1.588105) (cf. p. 23).
- [75] X. QIU et R. P. JOSHI. « Dynamic Analysis of Material Ejection from Cathodic Metal Nano-Tips Due to Local Heating and Field Generated Stress ». In : *Physics of Plasmas* 25.2 (fév. 2018), p. 022109. ISSN : 1070-664X, 1089-7674. DOI : [10.1063/1.5018441](https://doi.org/10.1063/1.5018441) (cf. p. 23).
- [76] Ville JANSSON et al. « Growth mechanism for nanotips in high electric fields ». en. In : *Nanotechnology* 31.35 (août 2020), p. 355301. ISSN : 0957-4484, 1361-6528. DOI : [10.1088/1361-6528/ab9327](https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab9327). URL : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6528/ab9327> (visité le 10/12/2020) (cf. p. 23).
- [77] G. P. ŠKORO et al. « Yield Strength of Molybdenum, Tantalum and Tungsten at High Strain Rates and Very High Temperatures ». In : *Journal of Nuclear Materials* 426.1 (juill. 2012), p. 45-51. ISSN : 0022-3115. DOI : [10.1016/j.jnucmat.2012.03.044](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.03.044) (cf. p. 23).
- [78] Wei WEI et al. « Tip Cooling Effect and Failure Mechanism of Field-Emitting Carbon Nanotubes ». In : *Nano Letters* 7.1 (déc. 2006), p. 64-68. ISSN : 1530-6984, 1530-6992. DOI : [10.1021/nl1061982u](https://doi.org/10.1021/nl1061982u) (cf. p. 23).
- [79] A.V. BATRAKOV, D.I. PROSKUROVSKY et S.A. POPOV. « Observation of the Field Emission from the Melting Zone Occurring Just before Explosive Electron Emission ». In : *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation* 6.4 (Aug./1999), p. 410-417. ISSN : 10709878. DOI : [10.1109/94.788735](https://doi.org/10.1109/94.788735) (cf. p. 23).
- [80] Sergey A. BARENGOLTS, Igor V. UIMANOV et Dmitry L. SHMELEV. « Prebreakdown Processes in a Metal Surface Microprotrusion Exposed to an RF Electromagnetic Field ». In : *IEEE Transactions on Plasma Science* 47.8 (août 2019), p. 3400-3405. ISSN : 0093-3813, 1939-9375. DOI : [10.1109/TPS.2019.2914562](https://doi.org/10.1109/TPS.2019.2914562) (cf. p. 23).
- [81] A S DMITRIEV et O A SINKEVICH. « Thermoelastic Destruction of Cathode Whiskers in Vacuum Breakdown ». In : (1982), p. 6 (cf. p. 23).
- [82] D. A. EASTHAM et P. A. CHATTERTON. « The Detection of Microparticle-Induced Breakdowns Using a Twin-Beam Laser Scattering System ». In : *IEEE Transactions on Electrical Insulation* EI-18.3 (juin 1983), p. 209-213. ISSN : 1557-962X. DOI : [10.1109/TEI.1983.298601](https://doi.org/10.1109/TEI.1983.298601) (cf. p. 23).
- [83] D. Kenneth DAVIES et Manfred A. BIONDI. « Mechanism of Dc Electrical Breakdown between Extended Electrodes in Vacuum ». In : *Journal of Applied Physics* 42.8 (juill. 1971), p. 3089-3107. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.1660690](https://doi.org/10.1063/1.1660690) (cf. p. 23).
- [84] Yingyao ZHANG et al. « Characteristics of Micro-Particle Phenomena under Electron Beam Bombardment in Vacuum Pre-Breakdown Processes ». In : *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation* 26.2 (avr. 2019), p. 618-624. ISSN : 1070-9878, 1558-4135. DOI : [10.1109/TDEI.2019.007659](https://doi.org/10.1109/TDEI.2019.007659) (cf. p. 23).
- [85] Lawrence CRANBERG. « The Initiation of Electrical Breakdown in Vacuum ». In : *Journal of Applied Physics* 23.5 (mai 1952), p. 518-522. ISSN : 0021-8979. DOI : [10.1063/1.1702243](https://doi.org/10.1063/1.1702243) (cf. p. 23).
- [86] B. SEZNEC et al. « Dynamics of Microparticles in Vacuum Breakdown : Cranberg's Scenario Updated by Numerical Modeling ». In : *Physical Review Accelerators and Beams* 20.7 (juill. 2017). ISSN : 2469-9888. DOI : [10.1103/PhysRevAccelBeams.20.073501](https://doi.org/10.1103/PhysRevAccelBeams.20.073501) (cf. p. 23).
- [87] Yingyao ZHANG et al. « Influence of Microscopic Electric Field Enhancement on Microparticle Impact Phenomena Based on Fractal Modeling ». In : *IEEE Transactions on Plasma Science* 45.9 (sept. 2017), p. 2588-2595. ISSN : 0093-3813, 1939-9375. DOI : [10.1109/TPS.2017.2727542](https://doi.org/10.1109/TPS.2017.2727542) (cf. p. 23).



## Chapitre 2

# Modèle d'émission électronique par effet de champ thermo-assistée et algorithme de résolution numérique

*« Qui donc irait faire grief au physicien d'isoler la pesanteur des autres qualités du corps qu'il étudie et de négliger le parfum, la couleur et le goût de la pomme dont il observe la chute! »*

---

Jean Paulhan  
Entretien sur des faits divers – 1930

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Essence du problème multiphysique</b>	<b>32</b>
<b>2.2</b>	<b>Modèle d'émission électronique utilisé</b>	<b>34</b>
2.2.1	Théorie de Sommerfeld	34
2.2.2	Énergie normale, contribution au courant et fonction d'apport ( <i>supply function</i> )	37
2.2.3	Interface cathode-vide et coefficient de transmission	38
2.2.4	Calcul numérique de la densité de courant	42
2.2.5	Distribution énergétique des électrons émis	44
2.2.6	Bilan d'énergie des électrons et effet Nottingham	45
2.2.7	Température d'inversion Nottingham	47
<b>2.3</b>	<b>Résolution sous COMSOL et géométrie des aspérités</b>	<b>49</b>
2.3.1	Domaine de simulation et géométrie	49
2.3.2	Équations physiques et conditions aux limites	52
2.3.3	Maillage et puissance de calcul	56
<b>2.4</b>	<b>Perspectives d'amélioration du modèle</b>	<b>58</b>
2.4.1	Au-delà de la théorie de Sommerfeld	58
2.4.2	Meilleure modélisation de l'interface métal/vide	59
2.4.3	Au-delà de l'approximation BKW	64
2.4.4	Variation du travail de sortie et forme des émetteurs/aspérités	64
<b>2.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>66</b>

---

Afin de correctement saisir les résultats présentés dans la suite de cette thèse, il est d'abord nécessaire de rappeler en détail l'algorithme numérique sur lequel sont basées nos simulations physiques. Précisons aussi que le modèle d'émission électronique utilisé dans cette thèse a été développé dans le cadre d'une précédente collaboration entre les deux laboratoires du GeePs et du LPGP [1].



La première section de ce chapitre récapitule l'essence du problème multiphysique que représente l'émission électronique par effet de champ, sans entrer dans le détail des équations mathématiques.

La deuxième section reprend ensuite les différents ingrédients théoriques sous-jacents au modèle d'émission électronique. Pour permettre une lecture fluide, la majorité des développements mathématiques et justifications physiques relatifs à la théorie sont placés en annexes. Ces éléments y sont agencés et reformulés du point de vue original de l'auteur afin de les contextualiser dans le cadre de cette thèse et de son formalisme. Le but de ces annexes est d'éviter autant que possible au lecteur attentif de devoir aller chercher les différentes briques théoriques dans de multiples références extérieures.

La troisième section explique ensuite comment le modèle d'émission électronique est combiné à un solveur numérique commercial pour permettre une résolution temporelle des équations multiphysiques en géométrie 3D par la méthode des éléments finis.

Enfin, une quatrième section revient sur les hypothèses simplificatrices du modèle et discute les différentes perspectives d'amélioration au regard de l'état de l'art.

## 2.1 Essence du problème multiphysique

L'objectif principal de cette thèse est d'apporter un éclairage fondamental sur l'autoéchauffement de pointes émettrices d'électrons par effet de champ. Pour permettre une modélisation efficace, ce problème est réduit à son essence. On considère deux électrodes planes se faisant face, espacées d'une distance  $D_{\text{gap}}$ . Les électrodes sont soumises à une différence de potentiel  $V_{\text{app}}$ , de sorte que règne dans l'espace interélectrodes un champ électrique global  $E = V_{\text{app}}/D_{\text{gap}}$ . À la surface de la cathode sont distribuées des pointes micro/nanométriques qui peuvent correspondre à des aspérités indésirables ou des émetteurs intentionnellement gravés. En résolvant l'équation de Laplace dans l'espace interélectrodes, on obtient le champ local  $F|_{\Sigma}$  en tout point de la surface  $\Sigma$  de la cathode. On définit alors un facteur de renforcement de champ  $\beta$  à la surface de chaque aspérité comme le rapport champ local sur champ global :

$$\beta|_{\Sigma} := \frac{F|_{\Sigma}}{E} \quad (2.1)$$

Par effet de pointe, le champ sera fortement amplifié au sommet des émetteurs ( $\beta \gg 1$ ).

Pour les aspérités dont le champ au sommet dépasse le gigavolt par mètre, une émission notable d'électrons par effet de champ a lieu. Par conservation de la charge, cette émission entraîne la mise en place d'un courant dans la cathode. À l'intérieur des aspérités, la densité de courant  $j$ , amplifiée par la réduction de la section transverse, provoque un chauffage par effet Joule :

$$\dot{q} := \frac{j^2}{\sigma} \quad (2.2)$$

Ce chauffage sera d'autant plus important que la conductivité électrique  $\sigma$  des aspérités sera faible. En parallèle, le bilan énergétique entre les électrons émis et les électrons qui les remplacent est à l'origine d'un chauffage par effet Nottingham qui peut être modélisé par une densité de flux de chaleur défini en chaque point de la surface émettrice par :

$$\Phi_{\text{N}}|_{\Sigma} := \left| \frac{J}{e} \right| \mathcal{E}_{\text{N}} = \left| \frac{J}{e} \right| (\langle \epsilon_r \rangle - \langle \epsilon_e \rangle) \quad (2.3)$$

où  $J$  est la densité de courant émise,  $\langle \epsilon_e \rangle$  est l'énergie moyenne des électrons émis et  $\langle \epsilon_r \rangle$  celle des électrons qui les remplacent. La différence entre ces deux dernières quantités est usuellement appelée *énergie Nottingham* et est notée ici  $\mathcal{E}_{\text{N}}$ .

On détermine l'amplitude de ces sources de chaleur en résolvant de manière autocohérente les équations couplées de la chaleur et de la conservation de la charge. Lorsque l'amplitude est significative, il y a autoéchauffement de l'aspérité émettrice. L'augmentation de la température initie alors

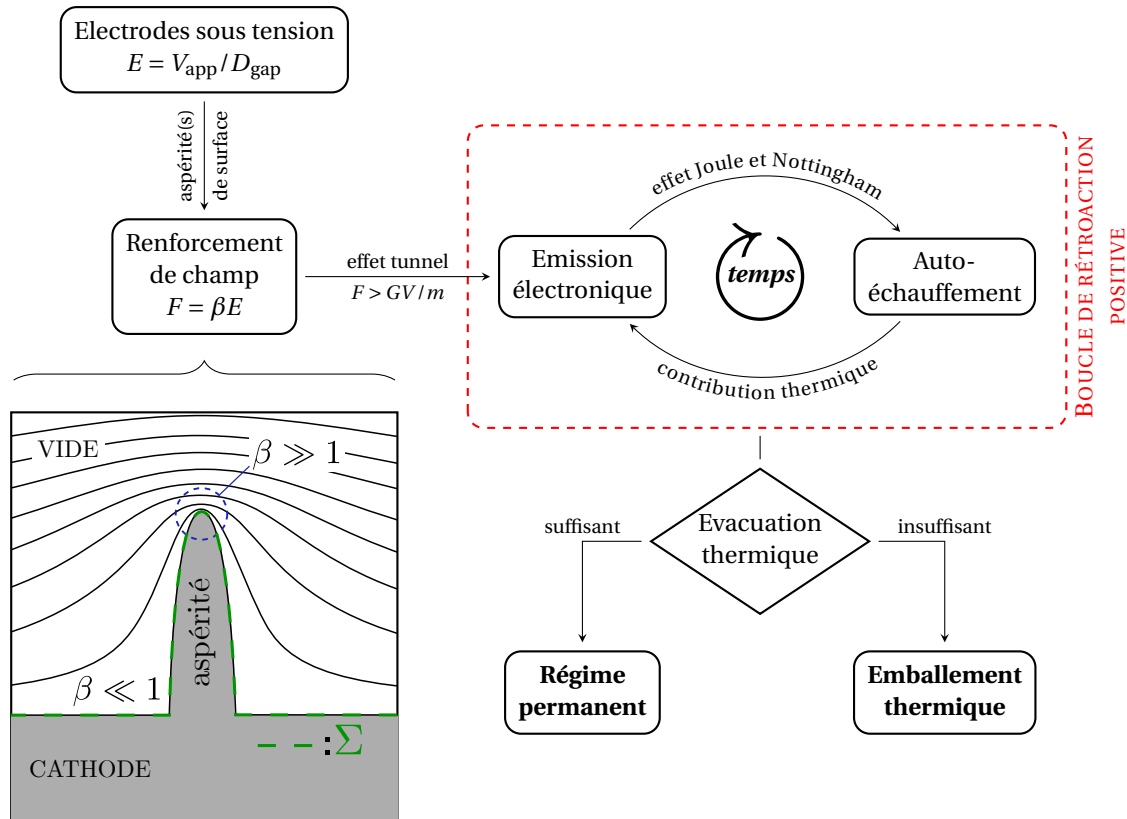


FIGURE 2.1 – Récapitulatif des phénomènes physiques clés impliqués dans l'émission électronique par effet de champ depuis le sommet d'une aspérité. Le schéma sous l'accolade illustre le renforcement de champ  $\beta$  au sommet d'une aspérité par la compression des isopotentiels (courbes noires).

une boucle de rétroaction positive : Plus la température est élevée, plus les électrons dans la cathode occuperont des niveaux d'énergies supérieurs ce qui facilite leur extraction (contribution thermique au courant). Ainsi, une température plus élevée résulte en un courant émis plus important et donc un plus fort chauffage résistif.

Cette boucle de rétroaction positive est généralement freinée dans le temps par l'évacuation de la chaleur vers le volume de la cathode, supposé suffisamment important pour jouer le rôle d'un thermostat. Notons aussi qu'une fois la température d'inversion Nottingham dépassée, la densité de flux de chaleur  $\Phi_N$  devient négative (*i.e.* les électrons émis à la surface deviennent plus énergétiques que les électrons qui les remplacent). L'effet Nottingham devient alors refroidissant et peut contribuer à tempérer l'emballement résistif.

Il est possible en revanche qu'une mauvaise évacuation thermique ou un chauffage résistif particulièrement important (mauvaise conductivité électrique) mène à l'emballement thermique d'une ou plusieurs aspérités. Nous verrons aussi au chapitre 3 que l'inversion Nottingham peut être la source même d'une instabilité thermique.

La figure 2.1 récapitule l'enchaînement des phénomènes physiques évoqués. Précisons que dans notre modèle, un emballement se traduit par une simulation qui atteint un régime permanent à des températures supérieures au point de fusion du matériau, ou par une absence d'évolution vers un régime permanent.

Pour résoudre les équations de Laplace, de la chaleur et de la conservation de la charge sur une géométrie donnée en deux ou trois dimensions, nous utilisons le logiciel COMSOL Multiphysics®. L'avantage de COMSOL est d'intégrer une routine de maillage par éléments finis performante, ce qui permet de se concentrer plus spécifiquement sur la physique qui nous intéresse (et pour laquelle il n'existe pas de solution clé en main à ce jour) : l'émission électronique par effet de champ. Pour ce

phénomène donc, nous utilisons notre propre modèle physique, développé en amont de cette thèse.

## 2.2 Modèle d'émission électronique utilisé

Cette section reprend point par point les ingrédients théoriques nécessaires à l'établissement d'un modèle d'émission électronique par effet de champ thermoassisté. Après un bref rappel de la théorie de Sommerfeld, nous introduisons la fonction d'apport (*supply function* en anglais) qui correspond à la densité de flux d'électrons arrivant à l'interface métal-vide par unité d'énergie. Pour déterminer la densité de courant émise, nous donnons ensuite la formule du coefficient de transmission des électrons incidents par effet tunnel à travers une barrière de potentiel dite de Schottky-Nordheim. La section s'achève sur les considérations énergétiques permettant de définir l'effet Nottingham et les subtilités associées. Précisons enfin que la plupart des calculs permettant d'établir l'expression des grandeurs introduites dans cette section sont détaillés en annexe.

### 2.2.1 Théorie de Sommerfeld

Pour décrire le comportement des électrons dans le métal, nous nous plaçons dans le cadre de la théorie de Sommerfeld. Cette théorie consiste à décrire un métal comme un gaz d'électrons en interaction avec un ensemble de noyaux situés aux noeuds du réseau cristallin. L'interaction électrique entre les électrons est donc en grande partie écrantée par celle des électrons avec leur noyau, qui elle-même devient faible pour les électrons qui appartiennent aux couches externes du métal. On distingue alors les électrons occupant les niveaux d'énergie les plus élevés, que l'on appelle *électrons de conduction*<sup>1</sup>, des autres électrons d'énergie inférieure contribuant à la cohésion entre les noyaux voisins du réseau cristallin.

Ce sont les électrons de conduction qui nous intéressent puisque ce sont essentiellement eux qui sont extraits au cours de l'émission électronique par effet de champ. Dans le cadre de la théorie de Sommerfeld, ils sont supposés avoir une interaction négligeable entre eux (*approximation des électrons indépendants*) et l'interaction avec la matrice d'ions formée par les noyaux et les autres électrons est remplacée par un simple potentiel attractif constant, piégeant les électrons (*cf. figure 2.2*). Il est alors usuel de fixer le référentiel d'énergie de sorte que le niveau du vide  $\epsilon_V$  soit d'énergie nulle. Le niveau du vide correspond à l'énergie potentielle d'un électron en dehors du métal. L'ensemble des niveaux de la bande de conduction sont alors négatifs (énergies de liaison) et on note  $\epsilon_C$  le niveau le plus bas de cette bande.

#### Densité d'états électroniques accessibles

Les interactions électriques étant ainsi artificiellement retirées, le modèle de Sommerfeld permet de considérer les électrons de conduction comme un simple gaz parfait de fermions neutres dont on peut étudier le comportement à l'aide des théories de la physique statistique à l'équilibre et de la physique quantique. Sous ces hypothèses, l'état d'un tel électron dans un puits de potentiel dépend uniquement de son énergie cinétique (et de son spin, up ou down). En mécanique quantique, on peut exprimer cette énergie en fonction du vecteur d'onde  $\vec{k}$  de l'électron :  $\hbar^2 k^2 / 2m$ , où  $\hbar \vec{k} = m \vec{v}$  est son impulsion. Par abus de langage, on utilisera directement  $\vec{k}$  pour parler de l'impulsion de l'électron. Cette impulsion est bien évidemment reliée à l'énergie totale d'un électron de la bande de conduction par

$$\epsilon = \epsilon_C + \frac{(\hbar k)^2}{2m}, \quad (2.4)$$

et on peut ainsi déterminer la densité d'états accessibles à une énergie  $\epsilon$  donnée selon l'expression :

$$\nu(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon - \epsilon_C} \quad (2.5)$$

1. Ces niveaux d'énergie les plus élevés sont eux-mêmes définis comme *niveaux de la bande de conduction*. Il est en effet logique que les électrons qui les occupent, étant ceux les moins liés au réseau cristallin, soient les plus mobiles et donc ceux qui contribuent majoritairement au courant de conduction au sein du métal.

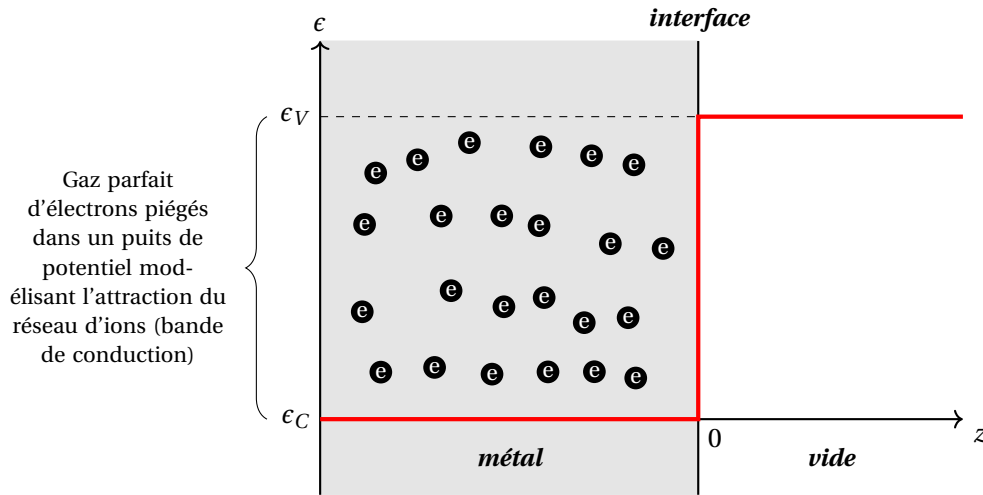


FIGURE 2.2 – Représentation schématique de l'interface métal/vide pour des électrons de conduction dans le cadre de la théorie de Sommerfeld. La courbe rouge représente le niveau d'énergie minimum qu'un tel électron peut occuper en fonction de sa position  $z$  dans la direction normale à la surface du métal :  $\epsilon_C$  dans le métal et  $\epsilon_V$  dans le vide.

Pour obtenir la densité volumique d'états en énergie, c'est-à-dire le nombre d'états accessibles par unité de volume et unité d'énergie en  $[\text{longueur}^{-3} \text{énergie}^{-1}]$ , il suffit de diviser  $\nu(\epsilon)$  par  $V$ . La figure 2.3 illustre justement l'évolution de  $\frac{\nu(\epsilon)}{V}$  avec la racine carrée de l'énergie cinétique. Tous ces états accessibles ne sont cependant pas occupés et il manque encore un ingrédient pour pouvoir obtenir la distribution en énergie des électrons de conduction.

### Statistique de Fermi-Dirac et fonction de distribution

Les électrons étant des fermions, ils obéissent au principe d'exclusion de Pauli. Le nombre d'électrons occupant un niveau d'énergie  $\epsilon$  donné ne peut alors qu'être 1 ou 0, ce qui mène sous l'hypothèse d'un gaz parfait à la statistique de Fermi-Dirac (cf. annexe A) :

$$\bar{N}(\epsilon, T, \varphi) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon - \epsilon_F}{k_B T}\right)} \quad (2.6)$$

où  $\bar{N}$  est le nombre moyen d'électron occupant le niveau d'énergie  $\epsilon$  (nécessairement inférieur ou égal à 1),  $k_B$  est la constante de Boltzmann, et  $\epsilon_F$  est le niveau de Fermi. Le niveau de Fermi est le niveau d'énergie au delà duquel le nombre d'occupations passe de 1 à 0 lorsque la température est nulle ( $T = 0$ ). Dans ce cas,  $\bar{N}$  vaut alors exactement 1 pour tous les niveaux d'énergie inférieurs à  $\epsilon_F$  et 0 pour ceux d'énergie supérieure.

On définit alors la différence d'énergie entre le niveau du vide  $\epsilon_V$  et le niveau de Fermi  $\epsilon_F$  comme le *travail de sortie* du métal (aussi appelé *potentiel d'extraction*) et noté  $\varphi$ . C'est en fait l'énergie minimale requise à température nulle pour pouvoir extraire un électron du métal. Le niveau du vide étant fixé à zéro avec nos conventions, le travail de sortie  $\varphi$  n'est autre que  $-\epsilon_F$ . Dans le cadre de notre modèle, le travail de sortie peut raisonnablement être considéré indépendant de la température, comme justifié en annexe. La figure 2.4 récapitule alors les conventions introduites jusqu'ici pour les niveaux d'énergie, en ajoutant la définition de *l'énergie de Fermi*  $\epsilon_F$  qui est l'énergie qu'il faut fournir à un électron du bas de bande de conduction pour qu'il atteigne le niveau de Fermi.

On peut alors obtenir la fonction de distribution en énergie totale  $\epsilon$  des électrons qui s'obtient simplement en multipliant la densité volumique d'états accessibles  $\nu(\epsilon)/V$  par la probabilité d'occupation de ces états  $\bar{N}(\epsilon, T, \varphi)$  :

$$f(\epsilon, T, \varphi) = \frac{\nu(\epsilon)}{V} \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{(\epsilon - \epsilon_C)^{\frac{1}{2}}}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon + \varphi}{k_B T}\right)} \quad (2.7)$$

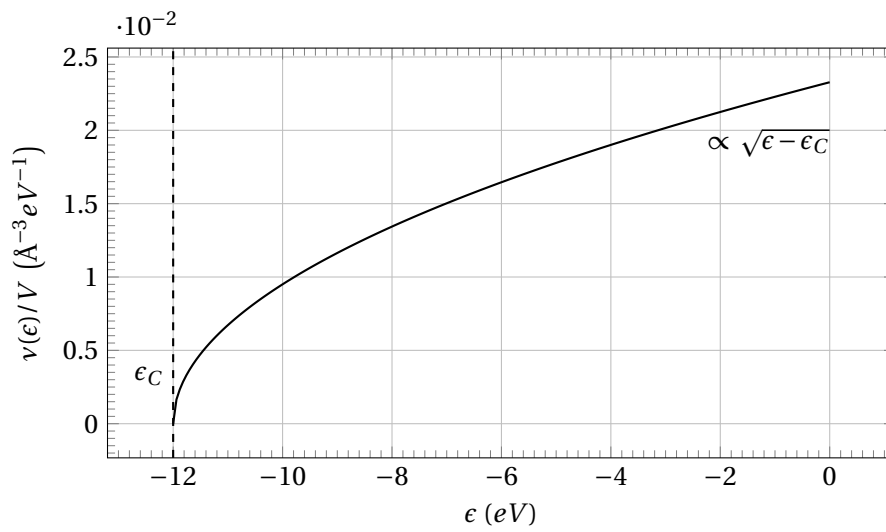


FIGURE 2.3 – Densité volumique et énergétique des états accessibles par unité de volume équivalent atome ( $\text{\AA}^{-3}$ ) pour un niveau du bas de bande de conduction arbitraire  $\epsilon_C = -12 \text{ eV}$ , dans le cadre de la théorie de Sommerfeld.

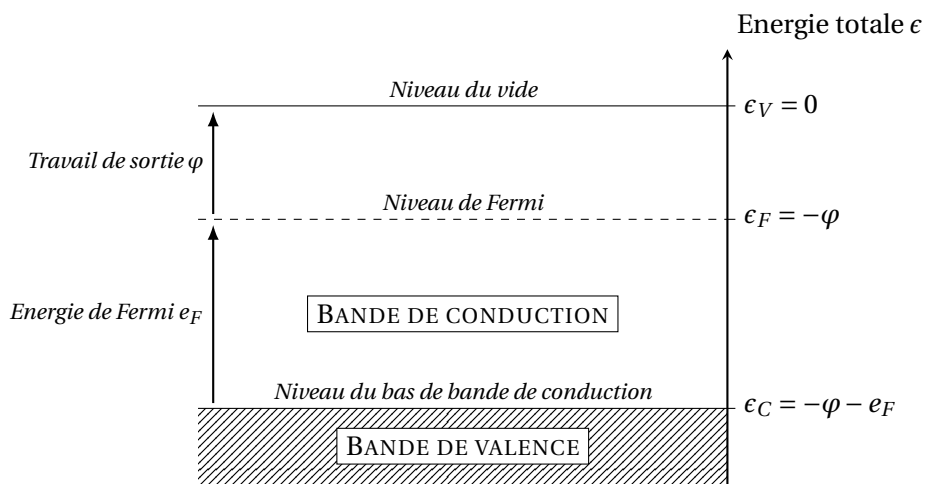


FIGURE 2.4 – Schéma reprenant les conventions choisies en termes de niveau d'énergie pour la description des électrons de conduction dans le cadre de la théorie de Sommerfeld.

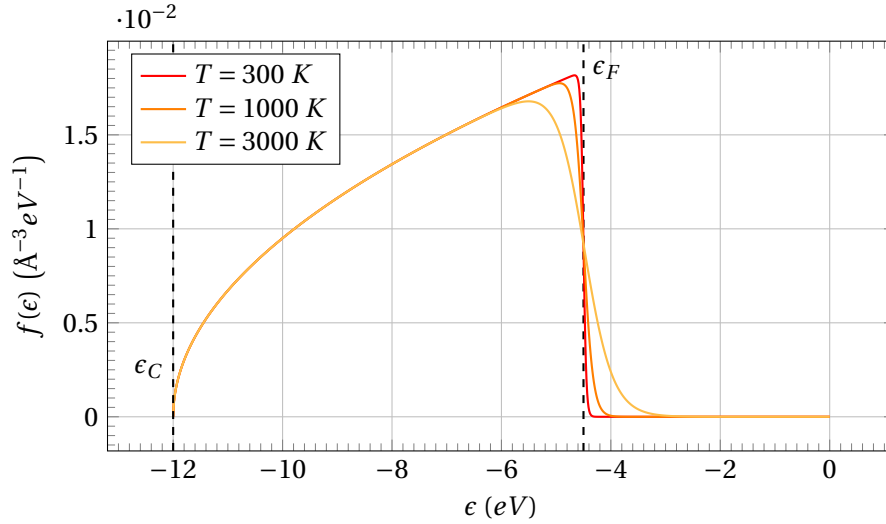


FIGURE 2.5 – Effet de la température sur la distribution volumique en énergie totale des électrons  $f(\epsilon, T, \varphi)$  dans le cadre de la théorie de Sommerfeld, pour un niveau du bas de bande de conduction  $\epsilon_C = -12 \text{ eV}$  et un niveau de Fermi  $\epsilon_F = -4.5 \text{ eV}$  choisis arbitrairement.

que l'on peut aussi écrire en norme d'impulsion  $k$ , et en remplaçant le travail de sortie par l'énergie de Fermi :

$$f(k, T, e_F) = \frac{4mk}{h^2} \times \left[ 1 + \exp\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - e_F\right) \right]^{-1} \quad (2.8)$$

La figure 2.5 trace la distribution  $f(\epsilon, T, \varphi)$  en fonction de l'énergie totale  $\epsilon$  pour différentes températures. La comparaison des différentes courbes montre que l'augmentation de la température a pour effet d'étendre la distribution à des niveaux d'énergie supérieure à l'énergie de Fermi.

### 2.2.2 Énergie normale, contribution au courant et fonction d'apport (*supply function*)

La fonction de distribution de l'équation 2.7 concerne l'énergie totale  $\epsilon$  des électrons. Sous l'hypothèse d'un gaz parfait, l'énergie cinétique est distribuée de manière isotrope entre les trois composantes d'espace, et on a :

$$\epsilon = \epsilon_C + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}. \quad (2.9)$$

En orientant la direction normale à l'interface selon  $z$ , on peut alors définir l'énergie normale  $\epsilon_n$  des électrons :

$$\epsilon_n = \epsilon_C + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (2.10)$$

À l'interface métal vide, les électrons contribuant au courant ont nécessairement une énergie normale non nulle, donc une vitesse  $v_z$  non nulle. La densité de courant classique selon  $z$  dans la cathode s'écrirait alors :

$$j_z = -en\bar{v}_z = -e \int f(v_z) v_z dv_z \quad (2.11)$$

où  $f(v_z)dv_z$  est la densité volumique d'électrons ayant une vitesse  $v_z$  à  $dv_z$  près, de sorte que  $n$  est bien la densité volumique d'électrons :

$$n = \int f(v_z) dv_z \quad (2.12)$$

et  $\bar{v}_z$  la vitesse moyenne des électrons dans la direction  $z$  :

$$\bar{v}_z = \frac{\int f(v_z) v_z dv_z}{\int f(v_z) dv_z} \quad (2.13)$$

Le produit  $f(v_z)v_z dv_z$  correspond ici à la densité de flux d'électrons arrivant à l'interface avec une vitesse selon  $z$  entre  $v_z$  et  $v_z + dv_z$ . Dans ce cas classique, la fonction d'apport (*supply function* en anglais) correspondrait alors au produit  $f(v_z)v_z$ .

On peut construire la densité de courant  $J$  extraite à l'interface métal-vide par analogie. Les électrons étant décrits dans le cadre de la mécanique quantique, on a  $v_z = \hbar k_z / m$ . Par ailleurs, il faut prendre en compte que chaque électron arrivant avec une impulsion  $k_z$  donnée aura une probabilité de passer par effet tunnel (et donc de contribuer au courant) qui s'exprime par le *coefficient de transmission*, noté  $D(k_z, F)$ . Ainsi, la contribution au courant par gamme d'impulsion comprise entre  $k_z$  et  $k_z + dk_z$  s'exprime

$$\frac{dJ}{dk_z} = -ef(k_z) \frac{\hbar k_z}{m} \times D(k_z, F) \quad (2.14)$$

où  $f(k_z)$  est une distribution volumique de vitesse en [*volume*<sup>-1</sup> · *impulsion*<sup>-1</sup>], de sorte que  $f(k_z)dk_z$  est la densité volumique en [*volume*<sup>-1</sup>] des électrons ayant une impulsion comprise entre  $k_z$  et  $k_z + dk_z$ .

Cette distribution  $f(k_z)$  peut en fait être relié à la distribution en énergie totale des électrons  $f(\epsilon, T, \varphi)$  (Eq. 2.7) par l'intermédiaire de la relation 2.9. L'annexe B détaille alors le calcul qui permet d'obtenir *in fine* la densité de courant en intégrant sur toutes les énergies normales accessibles :

$$J(F, T, \varphi) = -e \int_{\epsilon_C}^{+\infty} \frac{4\pi m k_B T}{h^3} \cdot \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{\epsilon_n + \varphi}{k_B T} \right) \right) \times D(\epsilon_n, F) d\epsilon_n \quad (2.15)$$

On définit alors la fonction d'apport comme la quantité

$$SF(\epsilon_n, T, \varphi) := \frac{4\pi m k_B T}{h^3} \cdot \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{\epsilon_n + \varphi}{k_B T} \right) \right), \quad (2.16)$$

homogène à [*surface*<sup>-1</sup> · *temps*<sup>-1</sup> · *energie*<sup>-1</sup>]. C'est bien une densité de flux d'électrons à l'interface par unité d'énergie normale et la quantité  $SF(\epsilon_n, T, \varphi)d\epsilon_n$  correspond au nombre d'électrons qui arrive à l'interface par unité de temps et de surface avec une énergie  $\epsilon_n$  à  $\epsilon_n$  près.

La figure 2.6 montre la variation de cette fonction d'apport avec la température en électron par ( $eV \cdot nm^2 \cdot fs$ ). Le choix des unités de distance et de temps est lié à la vitesse d'agitation thermique des électrons. Cette vitesse étant de l'ordre de  $10^6$  m/s, un électron parcourt environ un nanomètre en une femtoseconde.

### 2.2.3 Interface cathode-vide et coefficient de transmission

Nous avons défini la fonction d'apport mais il reste à déterminer le coefficient de transmission  $D(\epsilon_n, F)$  intervenant dans l'équation de la densité de courant 2.15. Comme ce coefficient correspond à la probabilité de passage par effet tunnel il apparait évident qu'il dépende de la forme de la barrière de potentiel à traverser à l'interface métal-vide (*cf.* courbe rouge sur la figure 2.2). Dans le cas de l'émission électronique par effet de champ, l'application d'un champ électrique de norme  $F$  va modifier cette barrière de potentiel.

#### Barrière de potentiel de Schottky-Nordheim

Décrivons analytiquement le potentiel ressenti par un électron le long de la direction normale à la surface du métal  $z$ . À l'intérieur du métal (conducteur), le champ ne pénètre pas et l'énergie potentielle commune à tous les électrons est simplement  $\epsilon_C$ . À l'extérieur (dans le vide) on a un champ électrique  $\vec{F} = F\vec{e}_z$ , que l'on suppose constant sur au moins quelques dizaines de nanomètres à partir de l'interface. À ce champ il faut ajouter l'influence de la surface métallique sur le potentiel perçu par un électron à son abord, du fait de sa propre charge.

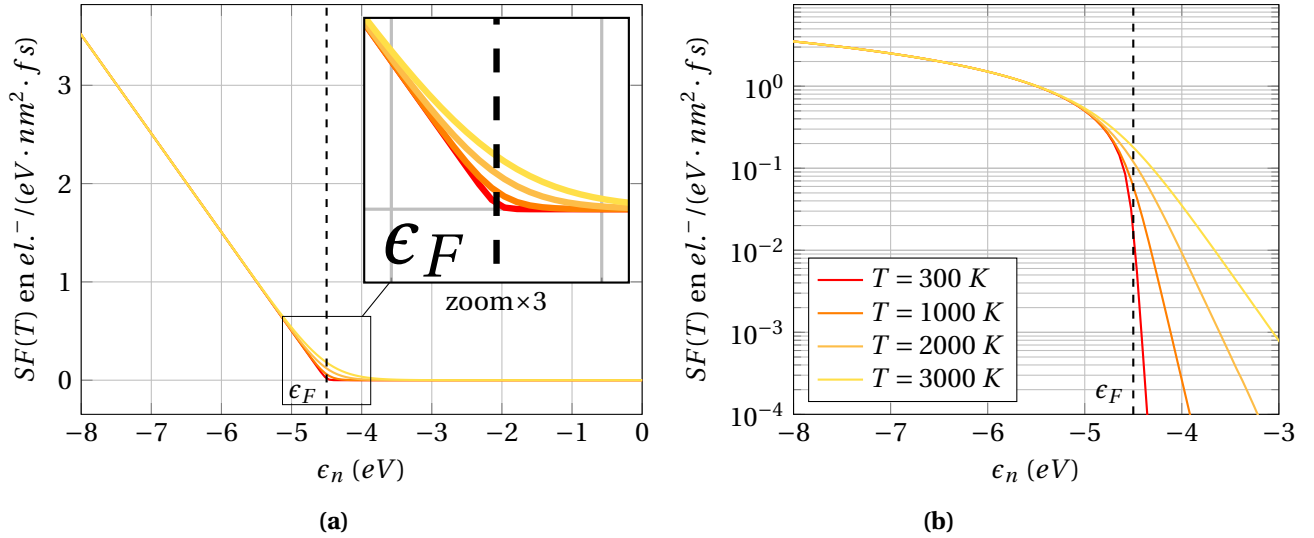


FIGURE 2.6 – Variation de la fonction d'apport  $SF(T)$  avec la température pour un niveau de Fermi  $\epsilon_F = -4.5$  eV. **(a)** : échelle linéaire. **(b)** : échelle logarithmique. La légende de couleur est commune. L'unité de distance (nm) et de temps (fs) sont choisies de manière cohérente avec la vitesse d'agitation thermique des électrons.

En effet, dès lors qu'on plonge un métal dans un champ électrique, les charges superficielles du métal se réorganisent pour le compenser, de sorte que l'interface métal-vide reste toujours une équipotentielle. Pour conserver un développement analytique et une barrière de potentiel indépendante de la densité de courant émise, nous déterminons le potentiel perçu par un électron à proximité de l'interface par la méthode des charges images. L'annexe C détaille alors le calcul qui permet d'obtenir l'expression suivante :

$$\mathcal{E}(z > 0) = -eFz - \underbrace{\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z}}_{\text{charge image}} \quad (2.17)$$

Cette barrière triangulaire arrondie par l'effet de la charge image (cf. figure 2.7) est couramment appelée *barrière de Schottky-Nordheim*. Cette appellation fait référence à Walter Schottky qui fut le premier à prévoir l'effet de l'abaissement de la barrière de potentiel par la charge image sur l'émission thermoionique en présence d'un champ électrique, et à Lothar Nordheim qui développa la première résolution analytique de l'émission par effet de champ à travers une telle barrière [2].

On peut alors obtenir la valeur maximum de cette barrière par une simple dérivation de l'équation 2.17 :

$$\mathcal{E}_{\max} = -\sqrt{\frac{e^3 F}{4\pi\epsilon_0}} = \mathcal{E}(z^*) \quad (2.18)$$

où  $z^*$  est la position de ce maximum.

La valeur absolue de cette dernière expression donne l'abaissement Schottky de la barrière :

$$\Delta\varphi = |\mathcal{E}_{\max}| = \sqrt{\frac{e^3 F}{4\pi\epsilon_0}} \quad (2.19)$$

En plus de cet abaissement, on voit que sous l'effet d'un champ électrique, l'épaisseur de la barrière de potentiel perçue par un électron dans le métal à une énergie  $\epsilon_n$  donnée n'est plus infinie, mais vaut  $\Delta z(\epsilon_n)$ , définie pour un électron d'énergie normale  $\epsilon_n$  par les racines  $z_{1,2}$  de l'équation  $\mathcal{E}(z) = \epsilon_n$ . Or, plus la barrière est mince, plus la probabilité de sortie d'un électron par effet tunnel est grande. Il faut cependant que l'épaisseur soit très faible, typiquement de l'ordre du nanomètre, pour que l'effet



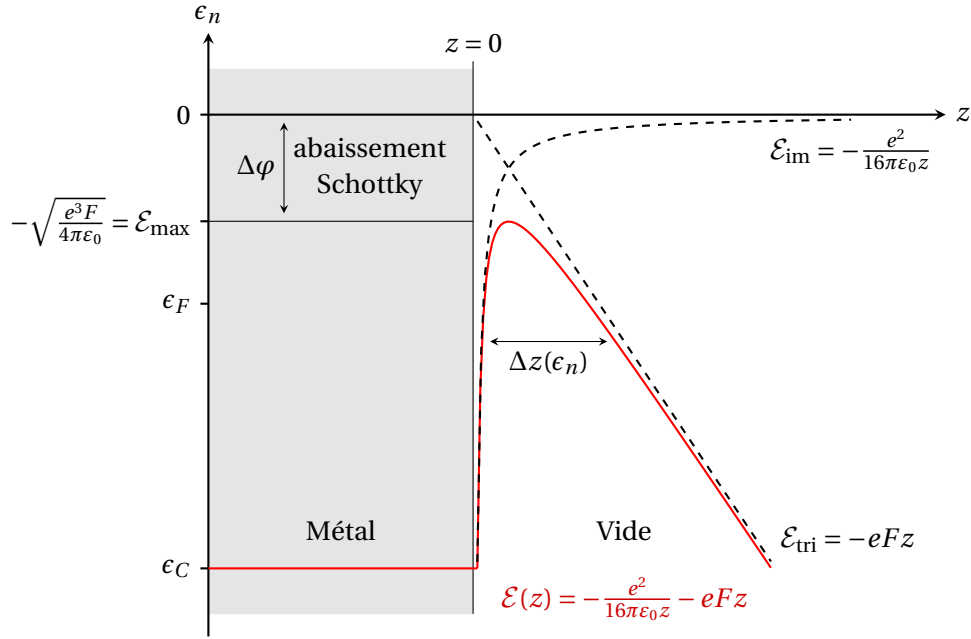


FIGURE 2.7 – Barrière de Schottky-Nordheim (en rouge) et abaissement Schottky correspondant. Cette forme de barrière de la prise en compte de la charge image dans le calcul du potentiel ressenti par un électron à l'interface.

tunnel ne soit pas négligeable. La figure 2.8 donne un aperçu quantitatif de la modification de la barrière de potentiel en fonction de l'amplitude du champ. On voit qu'en deçà d'un champ électrique de l'ordre du gigavolt par mètre l'épaisseur de la barrière est à peine modifiée, et ne permettra par conséquent aucune transmission par effet tunnel.

### Coefficient de transmission

À partir de la forme analytique de la barrière de potentiel, nous pouvons utiliser l'équation de Schrödinger sur la fonction d'onde  $\psi$  des électrons pour déterminer le coefficient de transmission  $D(\epsilon_n, F)$ . L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.20)$$

Pour un électron d'énergie normal  $\epsilon_n$ , cette équation se traduit dans l'espace des positions à une dimension ( $z > 0$ ) par :

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon_n - \mathcal{E}(z))\psi(z) = 0 \quad (2.21)$$

où l'on a utilisé l'expression du Hamiltonien dans l'espace des positions :

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + \mathcal{E}(z) \quad (2.22)$$

Le coefficient de transmission d'un électron est alors défini à partir du courant de probabilité  $Y$  associé à sa fonction d'onde  $\psi$  :

$$Y(z) = \frac{-i\hbar}{2m} \left[ \psi^*(z) \frac{\partial\psi(z)}{\partial z} - \psi(z) \frac{\partial\psi^*(z)}{\partial z} \right] \quad (2.23)$$

C'est précisément le rapport du courant de probabilité transmis dans le vide  $Y_{\text{trans}}$  défini au delà de la barrière de potentiel ( $z > \Delta z(\epsilon_C)$ ) sur le courant de probabilité incident  $Y_{\text{inc}}$  défini dans le métal en amont de la barrière ( $z < 0$ )

$$D(\epsilon_n, F) = \frac{Y_{\text{trans}}}{Y_{\text{inc}}} \quad (2.24)$$

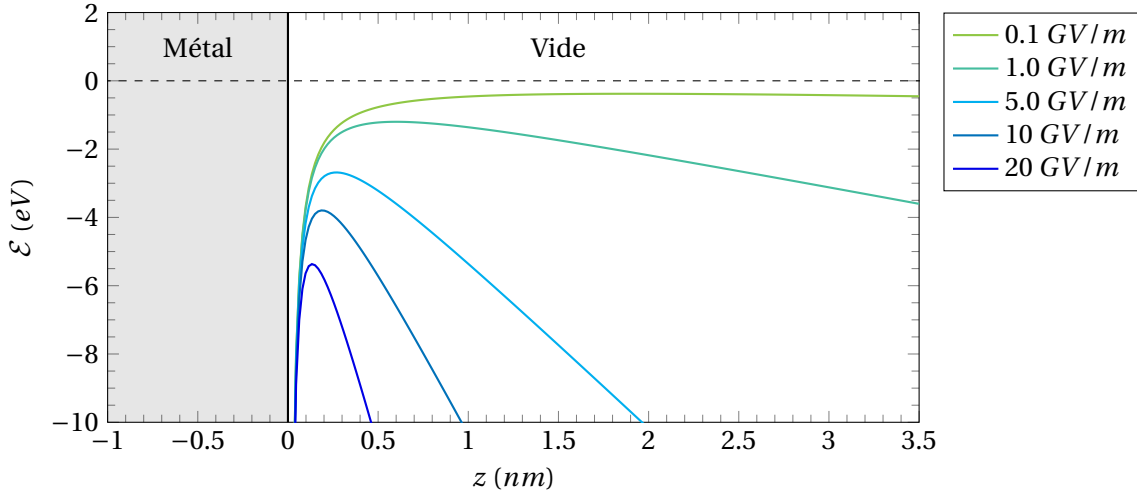


FIGURE 2.8 – Modification de la barrière de potentiel vue par un électron en fonction de l'amplitude du champ électrique  $F$  à la surface de l'émetteur, dans le cadre du modèle des charges images (cf. Eq. 2.17).

pour un électron d'énergie normale  $\epsilon_n$  arrivant sur une barrière de Schottky-Nordheim associé à une amplitude de champ  $F$ .

L'annexe D décrit alors le développement et les hypothèses sous-jacentes qui permettent d'obtenir la forme finale du coefficient de transmission tel qu'utilisé dans notre modèle :

$$D(\epsilon_n, F) = \left[ 1 + \exp\left(\frac{4\sqrt{2m}|\epsilon_n|^{\frac{3}{2}}}{3\hbar eF} v(y)\right) \right]^{-1} \quad (2.25)$$

souvent écrite sous la forme :

$$D(\epsilon_n, F) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{4\sqrt{2}}{3} (4\pi\epsilon_0)^{-\frac{3}{4}} \left(\frac{m^2 e^5}{\hbar^4 F}\right)^{\frac{1}{4}} y^{-\frac{3}{2}} v(y)\right]} \quad (2.26)$$

où la principale difficulté a été insérée dans la fonction  $v(y)$ . Cette fonction peut être calculée à l'aide des intégrales elliptiques complètes de première et seconde espèce [3] :

$$K_1(k) := \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} d\theta \quad (2.27)$$

$$K_2(k) := \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta} d\theta \quad (2.28)$$

On obtient alors

$$v(y) = \begin{cases} \sqrt{1+y} \left[ K_2\left(\sqrt{\frac{1-y}{1+y}}\right) - y K_1\left(\sqrt{\frac{1-y}{1+y}}\right) \right] & \text{si } y \leq 1 \\ -\sqrt{\frac{y}{2}} \left[ (1+y) K_1\left(\sqrt{\frac{y-1}{2y}}\right) - 2 K_2\left(\sqrt{\frac{y-1}{2y}}\right) \right] & \text{si } y > 1 \end{cases} \quad (2.29)$$

que l'on peut aujourd'hui aisément calculer compte tenu de la littérature mathématique concernant  $K_1$  et  $K_2$  (voir par exemple [4]). En ce qui nous concerne, notre code d'émission est écrit en Fortran et nous avons utilisé les algorithmes proposés dans [5] (in ref. section 6.11).

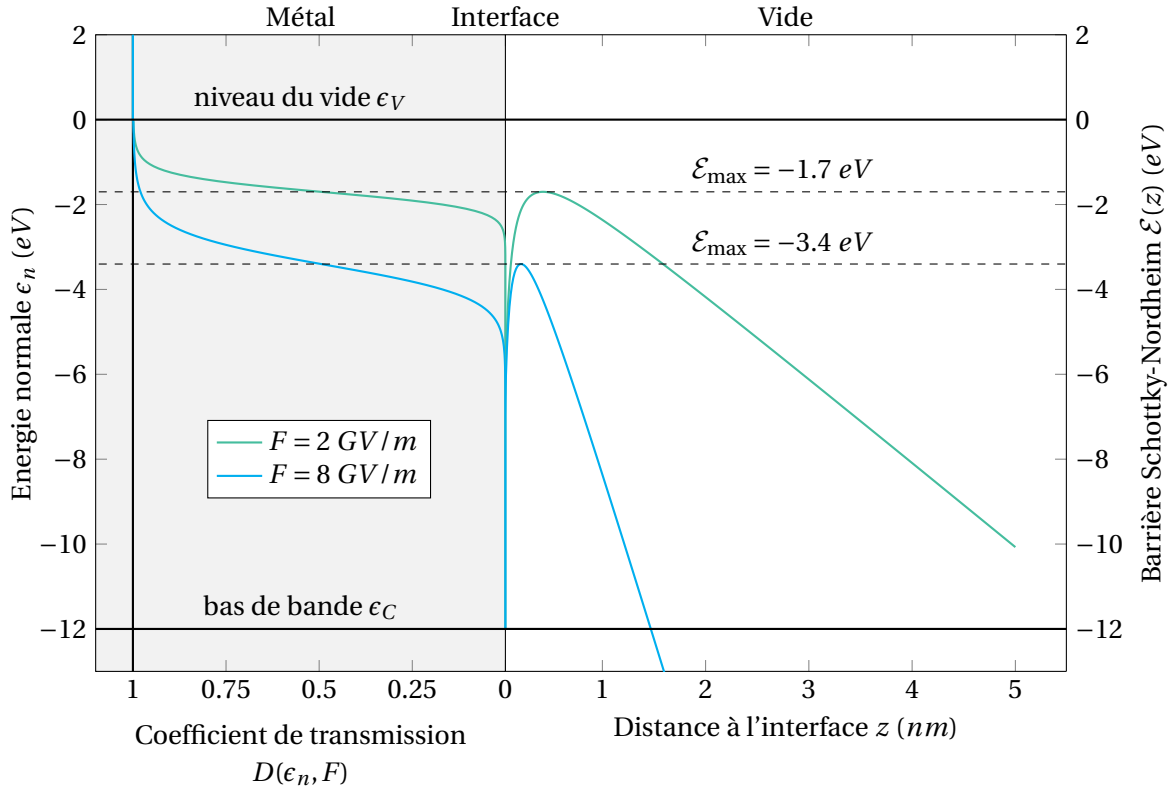


FIGURE 2.9 – Coefficient de transmission  $D(\epsilon_n, F)$  à l'interface métal/vide et forme de la barrière de Schottky Nordheim  $\mathcal{E}(z)$  dans le vide pour deux champs électriques différents. Le graphique du coefficient de transmission est tourné de  $90^\circ$  pour que son axe des abscisses coïncide avec l'axe des ordonnées du graphique de la barrière.

La figure 2.9 montre la variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie normale des électrons incidents, pour deux amplitudes de champ électrique différentes. On voit qu'à  $2 \text{ GV/m}$ , la probabilité de sortie d'un électron est quasiment nulle jusqu'à  $-3 \text{ eV}$ , ce qui signifie qu'un travail de sortie inférieur à  $3 \text{ eV}$  est nécessaire pour observer une émission notable à température ambiante. À  $8 \text{ GV/m}$ , ce seuil est décalé vers  $6 \text{ eV}$ , rendant possible l'émission pour un matériaux dont le travail de sortie vaut  $4.5 \text{ eV}$ .

### 2.2.4 Calcul numérique de la densité de courant

Pour obtenir enfin la densité de courant, on intègre le produit de la fonction d'apport avec le coefficient de transmission sur toutes les énergies normales accessibles. On obtient :

$$\begin{aligned}
 J(F, T, \varphi) &= -e \int_{\epsilon_C}^{+\infty} SF(\epsilon_n, T, \varphi) \times D(\epsilon_n, F) d\epsilon_n \\
 &= -\frac{4\pi m e}{h^3} \int_{\epsilon_C}^{+\infty} \frac{k_B T \cdot \ln \left[ 1 + \exp \left( -\frac{\epsilon_n + \varphi}{k_B T} \right) \right]}{1 + \exp \left[ \frac{4\sqrt{2}}{3} (4\pi\epsilon_0)^{-\frac{3}{4}} \left( \frac{m^2 e^5}{\hbar^4 F} \right)^{\frac{1}{3}} y^{-\frac{3}{2}} \nu(y) \right]} d\epsilon_n \\
 &= -\frac{4\pi m e}{h^3} \left( \int_{\epsilon_C}^0 \frac{k_B T \cdot \ln \left[ 1 + \exp \left( -\frac{\epsilon_n + \varphi}{k_B T} \right) \right]}{1 + \exp \left[ \frac{4\sqrt{2}}{3} (4\pi\epsilon_0)^{-\frac{3}{4}} \left( \frac{m^2 e^5}{\hbar^4 F} \right)^{\frac{1}{3}} y^{-\frac{3}{2}} \nu(y) \right]} d\epsilon_n + \int_0^{+\infty} k_B T \cdot \ln \left[ 1 + \exp \left( -\frac{\epsilon_n + \varphi}{k_B T} \right) \right] d\epsilon_n \right)
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

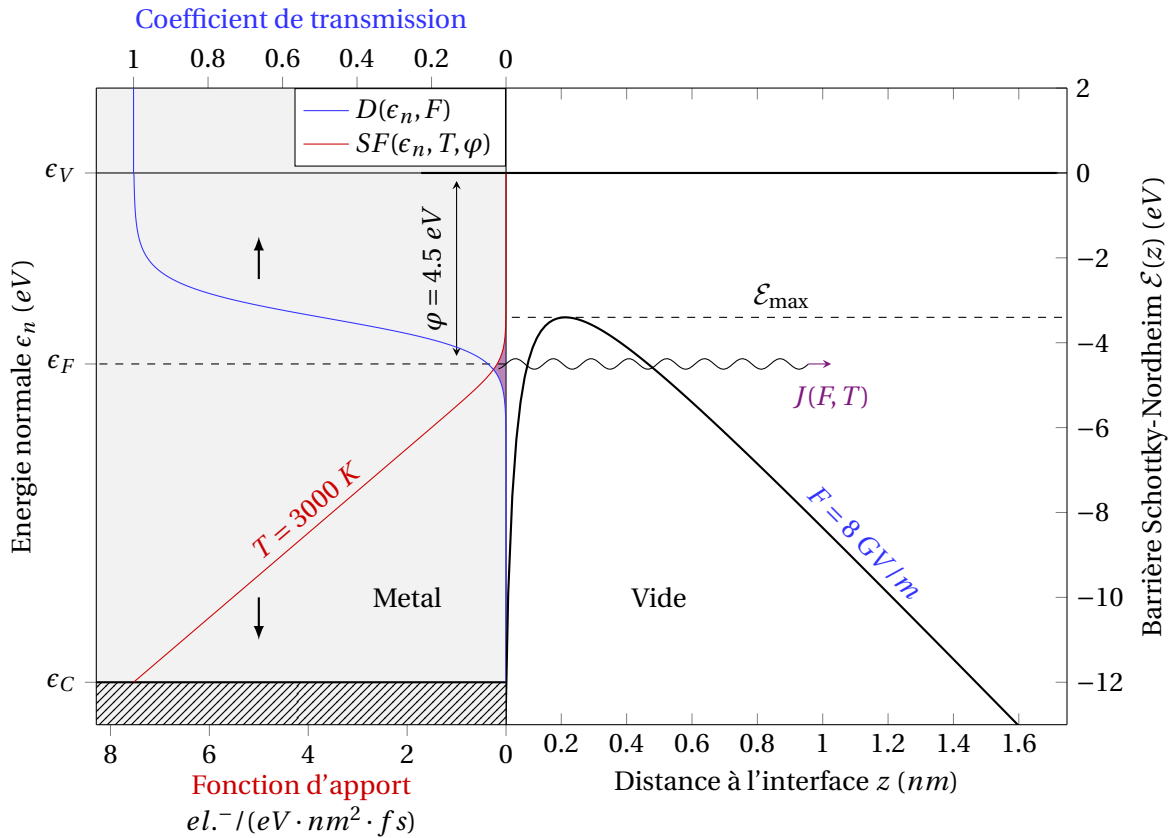


FIGURE 2.10 – Figure récapitulative de l'émission électronique par effet de champ pour un champ de  $8 \text{ GV/m}$ , une température de  $3000 \text{ K}$  et un travail de sortie de  $4.5 \text{ eV}$ . Dans le métal sont représentés la fonction d'apport (en rouge) et le coefficient de transmission (en bleu). L'intersection de ces deux courbes donne la densité de courant émise  $J(F, T)$  (en violet). Le graphique est tourné de  $90^\circ$  pour que son axe des abscisses coïncide avec l'axe des ordonnées du graphique de droite, qui trace dans le vide la barrière de Schottky Nordheim à  $8 \text{ GV/m}$ .

*In fine*, l'extraction d'électrons par effet de champ correspond à la superposition à une gamme d'énergie donnée d'une densité de flux d'électrons incident significative et d'une probabilité non nulle de sortir par effet tunnel (qui dépend de l'épaisseur de la barrière Schottky-Nordheim sur cette gamme d'énergie). Cette superposition est tracée sur la figure 2.10 pour le cas particulier d'un champ de  $8 \text{ GV/m}$ , une température de  $3000 \text{ K}$ , et un travail de sortie de  $4.5 \text{ eV}$ . Ces fortes valeurs de champ et de température ont été choisies de sorte à rendre plus visible la superposition entre coefficient de transmission et fonction d'apport.

Pour déterminer la densité de courant à n'importe quelle valeur de champ  $F$  et température  $T$ , notre modèle calcule numériquement l'expression 2.30, et les intégrales elliptiques sous-jacentes. Précisons alors que cette expression requiert la connaissance du niveau d'énergie du bas de bande de conduction  $\epsilon_C$ . Dans les faits cependant, le coefficient de transmission étant toujours totalement nul autour de  $\epsilon_C$  pour les amplitudes de champs électriques physiquement atteignables ( $\sim 10 \text{ GV/m}$ ), le calcul de l'intégrale est inchangé en intégrant depuis  $-\infty$ . Dans le calcul numérique, on fait le choix arbitraire de s'arrêter à  $-20 \text{ eV}$ . La figure 2.11 montre le résultat à travers la dépendance de la densité de courant  $J$  avec le champ  $F$  à  $300 \text{ K}$  pour deux travaux de sortie différents.

Une comparaison de la densité de courant  $J$  obtenue par notre calcul numérique avec le résultat des formules analytiques régulièrement utilisées dans la littérature est proposée en annexe E.

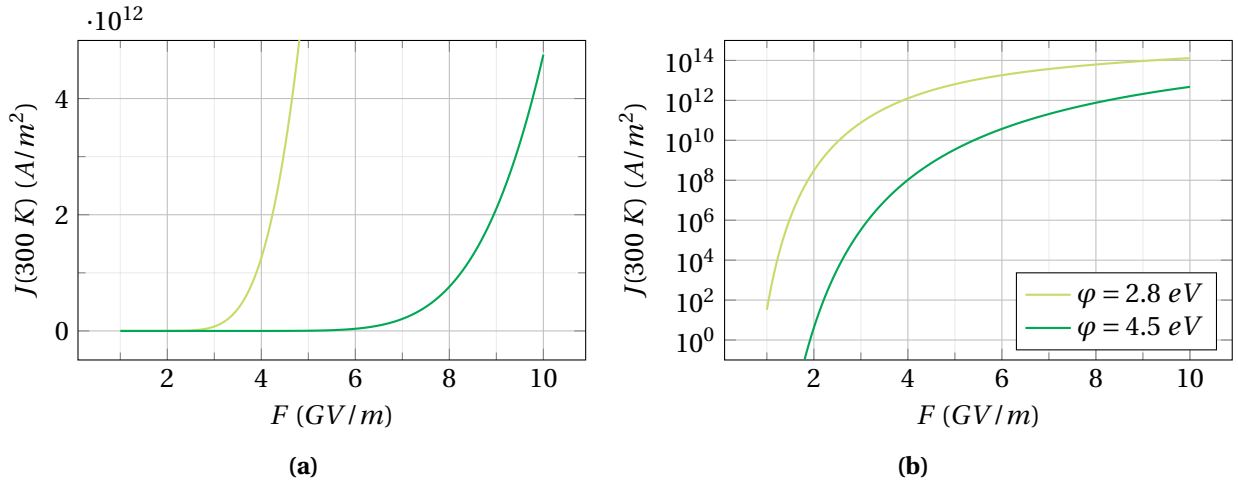


FIGURE 2.11 – Variation de la densité de courant à 300 K avec le champ  $F$  pour deux travaux de sortie différents. (a) : échelle linéaire. (b) : échelle log.

### 2.2.5 Distribution énergétique des électrons émis

Maintenant que nous avons compris le rôle combiné de la fonction d'apport et du coefficient de transmission dans l'émission par effet de champ, il apparaît évident que la distribution énergétique des électrons émis va fortement dépendre du champ, de la température et du travail de sortie. En fonction de ces paramètres, il se peut alors que l'énergie moyenne des électrons émis soit différente de celle des électrons qui les remplacent. Ce bilan d'énergie, qui peut être positif ou négatif, est à l'origine de l'effet Nottingham que nous détaillerons à la sous-section 2.2.6. Pour en déterminer l'amplitude, il faut d'abord déterminer la distribution énergétique des électrons émis.

#### Distribution en énergie normale

En ce qui concerne la distribution en énergie normale (*NED* pour *Normal Energy Distribution* en anglais) le calcul est direct et s'exprime ainsi :

$$NED(\epsilon_n, F, T) = \left| \frac{e}{J(F, T, \phi)} \right| SF(\epsilon_n, T, \phi) \times D(\epsilon_n, F) \quad (2.31)$$

de sorte que  $NED(\epsilon_n, F, T)d\epsilon_n$  représente la proportion d'électrons émis par unité de temps et de surface au champ  $F$  et à la température  $T$  avec une énergie normale égale à  $\epsilon_n$  à  $d\epsilon_n$  près. Diviser par le terme  $|J/e|$  qui correspond à la densité de flux d'électrons émis permet d'obtenir une distribution normalisée.

#### Distribution en énergie totale

Le calcul de la distribution en énergie totale des électrons émis (*TED* pour *Total Energy Distribution* en anglais) est plus délicat, car il nécessite de prendre en compte la répartition de l'énergie cinétique entre la composantes normales  $k_z$  et les composantes parallèles  $k_x$  et  $k_y$  (cf. Eq. 2.9). L'annexe F décrit le calcul qui permet d'obtenir l'expression suivante :

$$TED(\epsilon, F, T, \phi) = \left| \frac{e}{J(F, T, \phi)} \right| \frac{4\pi m}{h^3} \bar{N}(\epsilon, T, \phi) \int_{\epsilon_c}^{\epsilon} D(\epsilon_n, F) d\epsilon_n \quad (2.32)$$

de sorte que  $TED(\epsilon)d\epsilon = dJ(\epsilon)/J$  donne la proportion de densité de courant émise entre  $\epsilon$  et  $\epsilon + d\epsilon$ .

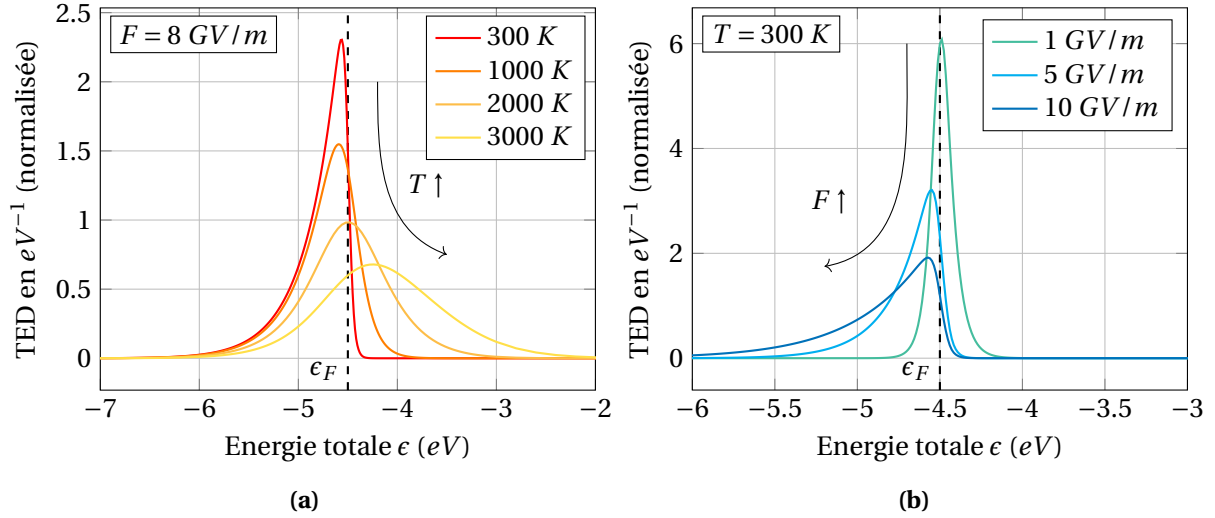


FIGURE 2.12 – Variation de la distribution en énergie totale des électrons  $TED(F, T, \phi)$  **(a)** : pour différentes températures à  $F = 8 \text{ GV/m}$  et **(b)** : pour différents champs électriques à  $T = 300 \text{ K}$ . Les deux figures ne sont pas aux mêmes échelles. Le travail de sortie vaut  $4.5 \text{ eV}$ . L'intégrale de chaque courbe est égale à l'unité.

La figure 2.12 illustre la distribution en énergie totale des électrons émis pour quelques valeurs typiques de champ et de température. On voit que comme attendu, une température plus élevée mène à une émission d'électrons en moyenne plus énergétique. À l'inverse, l'augmentation du champ permet d'extraire les nombreux électrons incidents aux énergies normales plus basses, en moyenne moins énergétiques. Il faut noter que notre définition de la  $TED$  est normalisée par  $J$ , de sorte que son intégrale vaut l'unité. Elle ne laisse donc pas voir l'augmentation du nombre total d'électrons transmis avec l'augmentation de la température ou du champ.

### 2.2.6 Bilan d'énergie des électrons et effet Nottingham

Si l'on considère le volume fermé de l'émetteur au cours de l'émission, chaque électron émis à sa surface est remplacé par un électron provenant de la cathode qui entre à sa base. Compte tenu de la dépendance de la  $TED$  avec  $F$  et  $T$ , les électrons quittant l'émetteur n'ont en général pas la même énergie (totale) que les électrons qui les remplacent. On définit alors l'*énergie Nottingham*  $\mathcal{E}_N$  comme l'écart entre la moyenne de ces deux énergies pour une émission à une valeur donnée de champ, de température et de travail de sortie :

$$\mathcal{E}_N(T, F, \phi) := \langle \epsilon \rangle_r - \langle \epsilon \rangle_e \quad (2.33)$$

Ainsi, l'émission d'électrons par effet de champ induit nécessairement une variation d'énergie par unité de temps au sein de l'émetteur que l'on appelle puissance Nottingham. On peut exprimer cette puissance par le biais du courant émis et de la moyenne pondérée de l'énergie Nottingham  $\bar{\mathcal{E}}_N$  sur toute la surface d'émission :

$$\mathcal{P}_N := \left| \frac{I}{e} \right| \bar{\mathcal{E}}_N = \left| \frac{I}{e} \right| \frac{\iint J \times \mathcal{E}_N dS}{\iint J dS} \quad (2.34)$$

où  $|I/e|$  n'est autre que le débit d'électrons émis.

Précisons que nous avons ici défini l'énergie Nottingham selon la convention « énergie qui entre dans l'émetteur moins énergie qui en sort ». Par conséquent, si  $\bar{\mathcal{E}}_N$  est positif,  $\mathcal{P}_N$  correspond à un chauffage global de l'émetteur tandis qu'il correspond à un refroidissement si  $\bar{\mathcal{E}}_N$  est négatif.

Se pose alors la question de la répartition de cette puissance dans l'émetteur. Selon Swanson et Crouser, l'échange d'énergie entre les électrons de conduction et le réseau (*the lattice* en anglais) s'opère à proximité de la zone d'émission, sur une fraction du diamètre de la pointe émettrice de

l'ordre d'une centaine de nanomètres [6] (*in ref.* Sec. III-C, §1). Ceci est lié au très faible libre parcours moyen des électrons de conduction vis-à-vis des interactions électron-phonon et électron-électron. De manière similaire, l'article de Fursey *et al.* de 1995 [7] présente l'effet Nottingham comme un phénomène en volume, au voisinage de l'émission. Aux échelles micrométriques en revanche, il est précisé que l'effet dans le volume de l'émetteur est négligeable de sorte que l'effet Nottingham peut être considéré comme un effet de chauffage de surface :

« *The Nottingham effect for a microtip is a volume heat source. For a small tip, the heat removed into its bulk is negligible, because its size is too small for electron-phonon energy exchange to occur. Therefore, for a normal cathode, the Nottingham effect can be considered as a surface heat source, a boundary condition for the heat transfer equation.* » [7] (*in ref.* Sec. 3, §2)

Par conséquent, en accord avec ce raisonnement, nous prenons l'effet Nottingham comme une condition aux limites en introduisant le flux de chaleur Nottingham. Celui-ci s'exprime à partir de la densité de flux d'électrons émis  $|J/e|$  au niveau de la surface d'émission :

$$\Phi_N(F, T, \varphi) = \frac{J}{-e} \mathcal{E}_N = \left| \frac{J}{e} \right| \times [\langle \epsilon \rangle_r - \langle \epsilon \rangle_e] \quad (2.35)$$

Les auteurs Swanson et Crouser notaient toutefois en 1966 un manque de description théorique des échanges énergétiques entre électron émis et électron de remplacement :

« *The details of the energy exchange between those electrons taking part in the conduction current and those taking part in the emission current is a matter which requires further theoretical studies.* » [6] (*in ref.* Sec. III-C, §1)

Bien que la prise en compte de l'effet Nottingham comme une condition aux limites est aujourd'hui une constante de tous les modèles thermiques modernes de l'émission électronique, il semble important de préciser qu'à la connaissance de l'auteur la justification théorique de la répartition spatiale de l'effet Nottingham à proximité de la surface d'émission n'a toujours pas été précisément développée depuis.

En se contentant de l'argument du libre parcours moyen, on peut poursuivre le calcul du flux de chaleur Nottingham. L'énergie moyenne des électrons émis s'exprime à partir de la distribution en énergie totale des électrons émis :

$$\langle \epsilon \rangle_e = \int_{\epsilon_c}^{+\infty} \epsilon \times TED(\epsilon, F, T, \varphi) d\epsilon \quad (2.36)$$

Comme pour la densité de courant ou la distribution en énergie totale, cette quantité est calculée numériquement.

L'énergie des électrons de remplacement en revanche, est prise égale au niveau de Fermi.

$$\langle \epsilon \rangle_r = \epsilon_F \quad (2.37)$$

Pour justifier cette valeur, il faut poser que les électrons de remplacement proviennent d'un réservoir d'électrons (le circuit). En supposant ce réservoir à température nulle (0 K), tous les niveaux en dessous du niveau de Fermi sont par définition occupés. Du fait de la continuité de la température à l'interface réservoir-émetteur, il en va de même pour les niveaux à l'entrée de l'émetteur. L'argument de Nottingham est alors de dire que les électrons du circuit ne peuvent entrer dans l'émetteur qu'avec une énergie au moins égale au niveau de Fermi, les niveaux inférieurs étant déjà remplis :

« *Consider the receiving plate of a tube for studying thermionic emission to be at 0 K. Then the electrons in the emission current cannot fall into quantum states lower than  $\epsilon_F$  upon being received because all of those states are filled. The electric current flows around the circuit at the level  $\epsilon_F$  [...] and flows into the emitter at this level.* » [8] (*in ref.* §2)

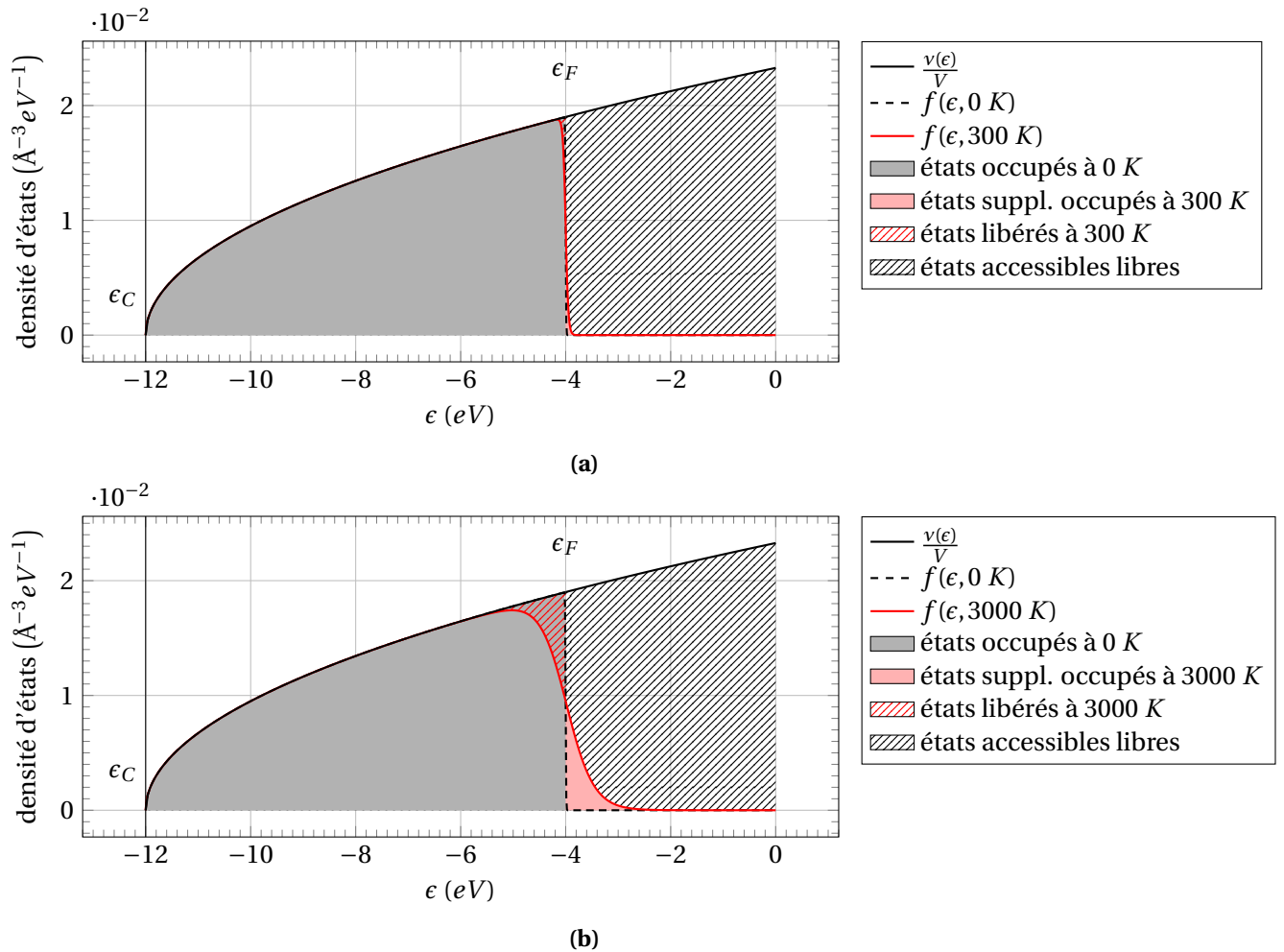


FIGURE 2.13 – Comparaison de la répartition énergétique des états occupés et des états libres (a) : à 300 K et (b) : à 3000 K, par rapport à la répartition à température nulle.

On peut étendre cet argument pour un circuit à température ambiante ( $T \sim 300\text{ K}$ ). Par rapport à une température nulle, on libère une petite portion de niveaux capables d'accueillir des électrons de remplacement en dessous du niveau de Fermi (Fig. 2.13, hachures rouges) tandis qu'on obtient une petite portion d'électrons d'énergie supérieure au niveau de Fermi (Fig. 2.13, aplats rosés) à laquelle correspond un grand nombre d'états accessibles disponibles (Fig. 2.13, hachure noire). À 300 K, ce transfert d'électrons depuis des états en dessous du niveau de Fermi vers des états au-dessus s'étend sur une faible plage d'énergie, de l'ordre de  $0.1\text{ eV}$ . Sur la figure 2.13a, on perçoit de ce fait très peu de différence entre la densité d'états occupés à 0 K (courbe noire en tiret) et celle à 300 K (courbe rouge). En conséquence, l'argument de Nottingham reste valable et l'énergie moyenne des électrons de remplacement peut toujours être prise égale au niveau de Fermi. À titre de comparaison, la figure 2.13b montre la situation à 3000 K. On voit que le transfert d'électrons s'étend sur plus d'un électron-volt. Les électrons de remplacement pourraient alors s'écouler dans l'émetteur à différents niveaux d'énergie. Le calcul de leur énergie moyenne nécessiterait dans ce cas un développement plus précautionneux de la physique en jeu.

### 2.2.7 Température d'inversion Nottingham

L'effet Nottingham reposant sur le bilan d'énergie  $\mathcal{E}_N$ , il vient naturellement que le flux de chaleur qui en découle peut être aussi bien positif que négatif, c'est-à-dire chauffant ou refroidissant. La figure 2.14 montre la variation de  $\mathcal{E}_N$  avec la température, pour différentes amplitudes de champ électrique. On voit que l'énergie Nottingham est globalement plus faible à champ électrique plus faible.



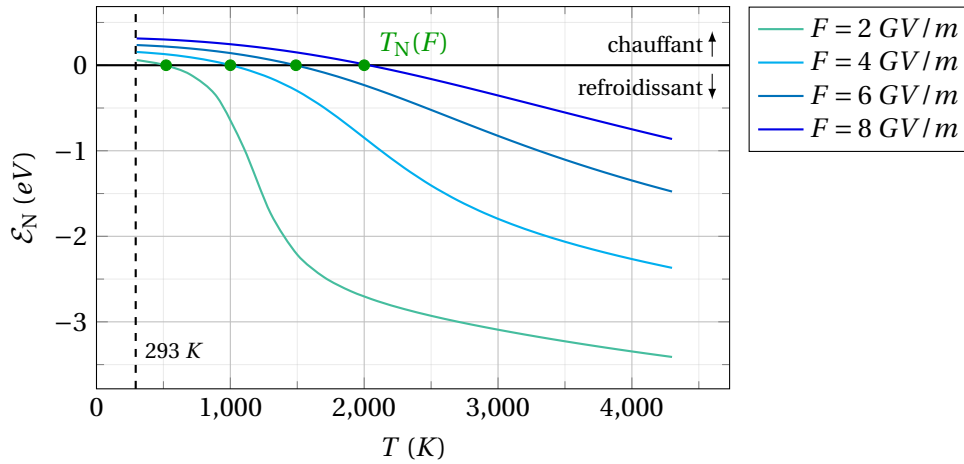


FIGURE 2.14 – Variation de l'énergie Nottingham  $\mathcal{E}_N$  avec la température pour différentes amplitudes de champ électrique. L'effet Nottingham est chauffant lorsque  $\mathcal{E}_N$  est positif et refroidissant lorsque  $\mathcal{E}_N$  est négatif.

Du fait de la dépendance en température de l'énergie des électrons émis  $\langle \epsilon \rangle_e(T)$ , on a le schéma suivant :

- Lorsque l'émission a lieu à basse température (pure émission de champ), très peu d'électrons ont une énergie supérieure au niveau de Fermi. L'énergie moyenne des électrons émis est donc nécessairement inférieure au niveau de Fermi et les électrons de remplacement apportent de l'énergie à l'émetteur : l'effet Nottingham est chauffant.
- À mesure que la température augmente, les niveaux d'énergie supérieurs au niveau de Fermi sont de plus en plus occupés. Ces derniers vont alors davantage contribuer à l'émission et l'énergie moyenne des électrons émis augmente en conséquence. Lorsque celle-ci dépasse le niveau de Fermi (énergie des électrons de remplacement), on obtient un bilan négatif et l'effet Nottingham devient refroidissant.

Entre ces deux cas, il existe nécessairement une température pour laquelle le bilan est exactement nul (l'énergie moyenne des électrons émis égalise le niveau de Fermi). Cette température est appelée température d'inversion Nottingham et on la note  $T_N$ . Elle est mise en évidence par un marqueur vert sur la figure 2.14. On voit par ailleurs que cette température augmente à champ électrique plus fort, ce qui signifie que l'effet Nottingham contribuera plus longtemps à l'autoéchauffement dans ce cas.

En fait, en utilisant la distribution en énergie développée par Young et Muller [9], on peut montrer analytiquement sous les mêmes hypothèses que la température d'inversion est proportionnelle au champ et inversement proportionnelle à la racine carrée du travail de sortie [10] :

$$T_N \simeq 5.32 \times 10^{-7} \frac{F}{\sqrt{\phi}} \quad (2.38)$$

avec  $F$  en  $V/m$  et  $\phi$  en  $eV$ . Cette formule se base sur la forme du coefficient de transmission obtenue par simple approximation BKW avec une barrière triangulaire. En parallèle, notre modèle prenant en compte l'abaissement Schottky de la barrière (barrière de Schottky-Nordheim) nous permet d'obtenir numériquement une valeur plus précise de la température d'inversion Nottingham. La figure 2.15 compare ces deux approches. Si le résultat est similaire à faible champ, l'écart se creuse une fois le champ  $F$  suffisant pour que l'abaissement Schottky se rapproche du travail de sortie :  $\Delta\phi = |\mathcal{E}_{\max}| \rightarrow \phi$  (cf. Eq. C.6). Cet écart met en évidence l'importance de prendre en compte la charge image pour mieux évaluer l'effet Nottingham.

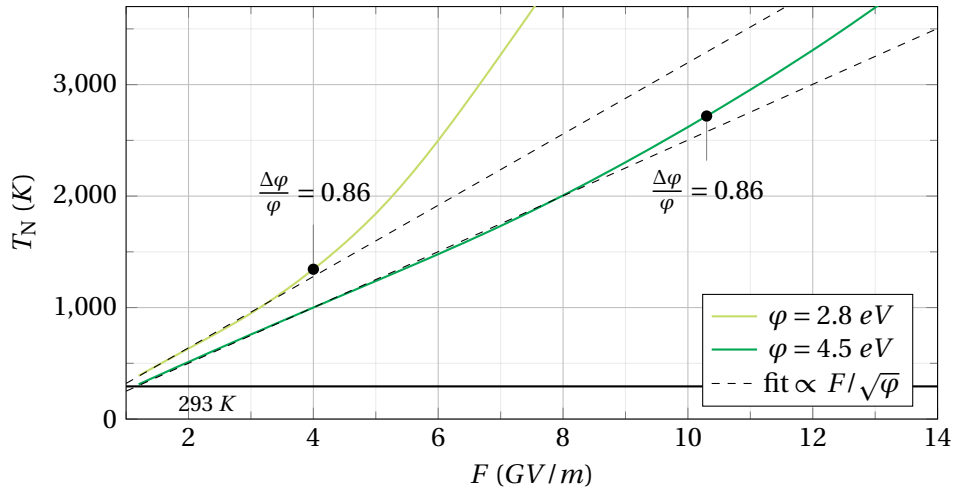


FIGURE 2.15 – Comparaison entre la température d'inversion Nottingham calculée par notre modèle numérique et la formule analytique 2.38 de Charbonnier *et al.* [10].  $\Delta\varphi/\varphi$  correspond au rapport de l'abaissement Schottky sur le travail de sortie (cf. Eq. 2.19).

## 2.3 Résolution sous COMSOL et géométrie des aspérités

Maintenant que nous avons tous les éléments de notre modèle d'émission, penchons-nous sur la résolution d'une simulation complète. Pour chaque valeur de travail de sortie que l'on souhaite étudier, nous utilisons dans un premier temps notre code d'émission électronique pour évaluer la densité de courant émise  $J(F, T, \varphi)$  et la densité de flux de chaleur Nottingham  $\Phi_N(F, T, \varphi)$  sur une large gamme de champ et de température englobant complètement toutes les situations physiques que nous explorons par la suite (typiquement, de  $10^7$  à  $2 \times 10^{10}$  V/m en champ électrique, et de 293 à 6000 K en température). Cette base de données permet de définir sous COMSOL<sup>®</sup> des fonctions interpolées de  $J(F, T, \varphi)$  et  $\Phi_N(F, T, \varphi)$  qui servent ensuite à évaluer les conditions aux limites des équations de la chaleur et de la conservation de la charge comme nous allons le voir. Mais avant, détaillons la géométrie des émetteurs et de notre domaine de simulation.

### 2.3.1 Domaine de simulation et géométrie

Pour rester le plus générique possible, la géométrie des électrodes consiste simplement en une cathode faisant face à une anode, toutes deux planes, et séparée d'une distance  $D_{\text{gap}}$ . Le modèle décrit dans la suite peut en revanche aisément être adapté à des structures plus complexes pour rendre compte de la spécificité d'une expérience donnée.

#### Géométries des émetteurs

À la surface de la cathode, on distribue alors un certain nombre de pointes, correspondant aux émetteurs des sources d'électrons ou aux aspérités dominantes des surfaces rugueuses. Pour pouvoir simplifier la résolution de l'émission d'une pointe unique, nous nous limitons dans ce travail à modéliser des géométries d'émetteurs axisymétriques. Si la source comporte par ailleurs plusieurs émetteurs à proximité il faudra le prendre en compte par une géométrie 3D, bien que les émetteurs individuels conservent leur symétrie axiale.

Depuis les années 1950, une grande diversité d'émetteurs à effet de champ a été explorée. Leur géométrie dépend essentiellement du matériau et du procédé de fabrication. Parmi les géométries les plus habituelles, on peut citer les cônes en molybdène de Spindt, les pointes de tungstène effilées des microscopes électroniques, les pyramides de silicone ou de carbone et enfin les "whisker", souvent des nanotubes de carbone. Utsumi [11] a tenté de regrouper ces formes de pointes en quelques catégories typiques illustrées sur la figure 2.16.

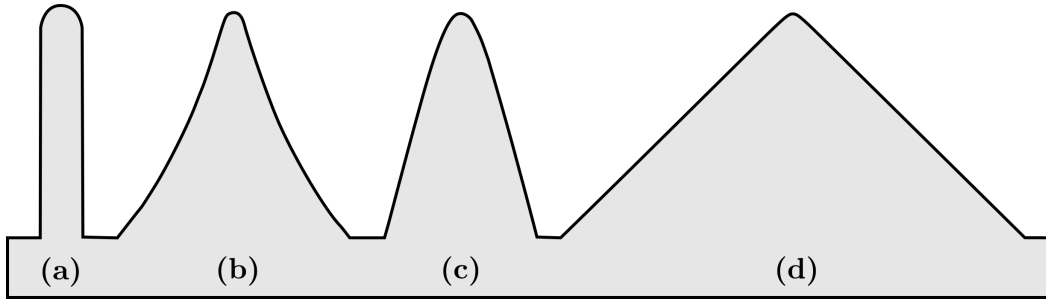


FIGURE 2.16 – Formes typiques des différents émetteurs telles que recensées par Utsumi [11] (*in ref.* Fig. 3). **(a)** : sphère-sur-cylindre. **(b)** : sphère-sur-parabole. **(c)** : sphéroïde-sur-cône. **(d)** : sphère-sur-pyramide.

Dans cette thèse, nous avons mené l'essentiel de nos explorations théoriques sur une géométrie hémioïloïde définie par deux paramètres : une hauteur  $H$  et un rayon  $R$ , qui donnent un facteur d'aspect  $f = H/R$ . Cette géométrie donne une équation de surface particulièrement simple en coordonnées cylindriques :

$$\frac{r^2}{R^2} + \frac{z^2}{H^2} = 1, \quad (2.39)$$

qui permet de déterminer le jacobien  $\mathcal{C}$  entre l'abscisse curviligne  $\ell$  et la coordonnée cylindrique radiale  $r$  :

$$\mathcal{C}(r) = \frac{d\ell}{dr} = \sqrt{1 + \frac{H^2 r^2}{R^4 - r^2 R^2}} \quad \text{où} \quad d\ell = \sqrt{dr^2 + dz^2} \quad (2.40)$$

dont on se servira au chapitre 5 pour déterminer le courant à partir de l'intégrale d'une densité de courant analytique.

On peut aussi déterminer le rayon de courbure à partir de la courbure de Gauss  $K$  qui est connue en tout point d'une hémioïloïde :

$$K = \left( \frac{Hr^2}{R^2} + \frac{R^2 z^2}{H^3} \right)^{-2} = \left( H \frac{r^2}{R^2} + \frac{R}{f} \frac{z^2}{H^2} \right)^{-2} \quad (2.41)$$

ce qui permet de déterminer le rayon de courbure  $r_C$  au sommet :

$$r_C = K^{-\frac{1}{2}} \Big|_{r=0, z=H} \Rightarrow r_C = \frac{R}{f} = \frac{H}{f^2} \quad (2.42)$$

Par ailleurs, la connaissance de la surface  $S$  et du volume  $V$  sera aussi nécessaire pour bien saisir l'effet du ratio surface sur volume sur l'autoéchauffement :

$$S = \pi R^2 \left( 1 + \frac{H}{R} \frac{\arcsin(e)}{e} \right) \quad \text{et} \quad V = \frac{2\pi}{3} R^2 H \quad \text{avec} \quad e^2 = 1 - \frac{1}{f^2} \quad (2.43)$$

où  $e$  est l'excentricité de l'ellipsoïde. En exprimant alors le ratio surface sur volume en fonction de  $H$  et  $f$  uniquement on obtient :

$$\frac{S}{V} = \frac{3}{2H} \left( 1 + f \frac{\arcsin(e)}{e} \right) \quad (2.44)$$

Enfin, la géométrie hémioïloïde offre une expression analytique du renforcement de champ à son sommet ce qui permettra d'évaluer la précision de notre maillage en comparant le résultat numérique à cette expression analytique.

### Cas spécifique des nanostructures de carbone

Une partie des travaux de cette thèse (présentée au chapitre 5 et 6) concerne l'émission électronique depuis des nanostructures de carbone bien spécifiques, dont la géométrie a été expérimentalement mesurée. La forme hémisphéroïde ne convient pas pour modéliser ces émetteurs. Nous utilisons donc pour ce cas spécifique une géométrie sphère-sur-cône, avec un angle de conicité  $\alpha$  globalement faible (de l'ordre de  $1^\circ$ ), de sorte que les émetteurs se rapprochent du cas limite sphère-sur-cylindre. Même faible, l'angle conserve toutefois un effet notable sur le renforcement de champ et plus significatif encore sur l'autoéchauffement, puisqu'il induit une augmentation du volume de l'émetteur. L'angle non nul requiert alors la distinction entre le rayon de la sphère au sommet, noté  $R_s$ , et le rayon du cône à la base, noté  $R_b$ .

Avec ces notations, l'équation de surface de la sphère-sur-cône s'écrit :

$$\begin{cases} z = H - R_s + R_s \sqrt{1 - \frac{r^2}{R_s^2}}, & 0 < r < R_s \cos \alpha \\ z = \frac{1}{\tan \alpha} (R_b - r), & R_s \cos \alpha < r < R_b \end{cases} \quad (2.45)$$

où l'on a pris soin de lisser la connexion de la sphère avec le cône pour conserver une surface de dérivée continue.

Un émetteur est donc défini par la donnée de trois paramètres, au choix parmi la hauteur  $H$ , le rayon de la sphère  $R_s$ , le rayon à la base  $R_b$  et l'angle  $\alpha$ . On choisit en général :

$$\{H, R_s, R_b\} \quad \text{avec} \quad \alpha = 2 \arctan \left[ \frac{\sqrt{H^2 + R_b^2 - 2HR_s} - H + R_s}{R_b + R_s} \right] \quad (2.46)$$

ou

$$\{H, f, \alpha\} \quad \text{avec} \quad R_b = \frac{H}{f} \cos \alpha + H \left( 1 - \frac{1 - \sin \alpha}{f} \right) \tan \alpha \quad (2.47)$$

avec  $f = H/R_s$  le facteur d'aspect. Le jacobien  $\mathcal{C}$  entre l'abscisse curviligne  $\ell$  et la coordonnée radiale s'écrit dans ce cas :

$$\begin{cases} \mathcal{C}(r) = \frac{R_s}{\sqrt{R_s^2 - r^2}}, & 0 < r < R_s \cos \alpha \\ \mathcal{C}(r) = \frac{1}{\sin \alpha}, & R_s \cos \alpha < r < R_b \end{cases} \quad (2.48)$$

### Domaine de simulation

En 3D, le domaine de simulation consiste en l'union de deux parallélépipèdes rectangles placés de part et d'autre du plan  $(x, y)$  à  $z = 0$ . Le parallélépipède supérieur de dimension  $\{2L_x, 2L_y, L_z\}$  modélise l'enceinte, tandis que le parallélépipède inférieur de dimension  $\{2L_x, 2L_y, L_{\text{cat}}\}$  modélise une portion de la cathode. La distance interélectrodes étant fixée à  $D_{\text{gap}} = 200 \mu\text{m}$  pour tous nos résultats, l'anode se trouve généralement en dehors du domaine de simulation (son action est bien prise en compte par des conditions aux limites adaptées, présentée dans la section suivante). Les émetteurs sont ensuite placés à la surface de la cathode, au niveau du plan  $(x, y)$  à  $z = 0$ . La figure 2.17 schématise le domaine de simulation en 3D pour deux pointes hémisphéroïdes identiques. Dans la pratique,  $L_x$ ,  $L_y$  et  $L_{\text{cat}}$  sont prises égales à dix fois la hauteur maximale des émetteurs, et vingt fois pour  $L_z$ . Ces dimensions permettent d'isoler complètement les émetteurs tout en conservant un domaine de simulation de taille raisonnable.

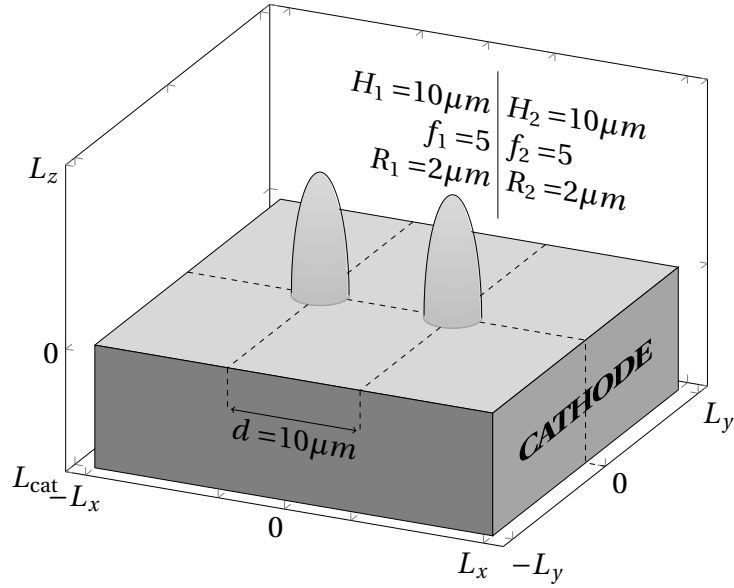


FIGURE 2.17 – Schéma du domaine de simulation en 3D pour deux émetteurs hémisphériques de hauteur  $H = 10 \mu m$  et de rayon  $R = 2 \mu m$ . Le schéma n'est pas à l'échelle (dans la pratique, les dimensions  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  et  $L_{cat}$  sont une dizaine de fois plus grandes que la hauteur  $H$ ).

### 2.3.2 Équations physiques et conditions aux limites

#### Électrostatique et renforcement du champ

Une fois la géométrie déterminée, la première étape de la modélisation multiphysique est la résolution stationnaire de l'équation de Laplace dans l'espace interélectrodes :

$$\Delta V_{vac} = 0, \quad \vec{F} = -\vec{\nabla} V_{vac} \quad (2.49)$$

où  $V_{vac}$  et  $\vec{F}$  désignent respectivement le potentiel et le champ électrique. Le vide est donc supposé parfait, et les perturbations du champ par la charge d'espace des électrons émis sont supposées négligeables.

Les conditions aux limites de l'électrostatique sont fixées comme suit. On applique une condition de Dirichlet à la surface de la cathode  $\Sigma$  de sorte que le potentiel y soit égal à  $V_{app}$ . À la limite supérieure du domaine de simulation (en  $z = L_z$ ), une condition de von Neumann assure que la norme du champ  $F$  soit égale au champ global  $E = V_{app}/D_{gap}$  où  $D_{gap}$  est la distance interélectrodes. Sur les frontières latérales (vecteur normal  $\vec{n}$ ) où  $x = \pm L_x$  ou  $y = \pm L_y$  on applique des conditions de symétrie de von Neumann sur le champ électrique :

$$V_{vac}|_{\Sigma} = V_{app}, \quad \vec{F}|_{L_z} = \vec{E}, \quad \vec{F}|_{\pm L_x} \cdot \vec{n} = 0, \quad (2.50)$$

À partir du champ électrique local  $F$  à la surface de la cathode  $\Sigma$ , on définit le renforcement de champ (FEF pour *Field Enhancement Factor* en anglais) :

$$\beta|_{\Sigma} = \frac{F|_{\Sigma}}{E} \quad (2.51)$$

Tandis que la valeur spécifique  $\beta$  au sommet d'un émetteur dépend du champ local qui y règne :

$$\beta = \frac{F_a}{E} \quad (2.52)$$

où  $F_a$  est la valeur de champ au sommet, indexé d'un  $a$  pour *apex* qui signifie sommet en anglais.

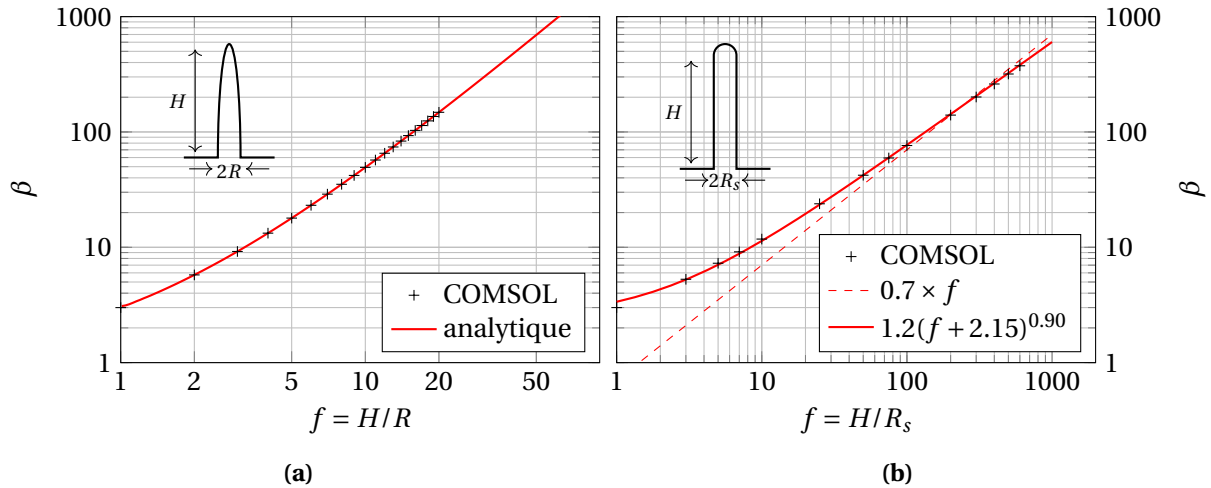


FIGURE 2.18 – Comparaison du renforcement de champ au sommet déterminé numériquement par COMSOL<sup>®</sup> avec les expressions 2.53 et 2.54. (a) : pour une géométrie hémisphéroïde. (b) : pour une géométrie sphère-sur-cylindre. Le calcul numérique est effectué en 2D axisymétrique pour la pointe isolée permettant un très bon raffinement du maillage.

Le renforcement de champ au sommet est défini pour une pointe isolée (n'interagissant avec aucune autre aspérité) dans la configuration de deux électrodes planes infinies. On le définit comme une propriété intrinsèque de la pointe, dépendant essentiellement de sa géométrie. Pour les pointes hémisphéroïdes, il en existe une expression analytique [12] (*in ref.* Sec. 2.1) :

$$\beta = \frac{(f^2 - 1)^{3/2}}{f \ln \left[ f + (f^2 - 1)^{1/2} \right] - (f^2 - 1)^{1/2}} \quad (2.53)$$

tandis qu'il n'existe pas de telle expression pour le renforcement au sommet d'un émetteur sphère-sur-cône. Pour le cas limite sphère-sur-cylindre cependant, plusieurs auteurs ont trouvé des approximations plus ou moins simples et robustes. La plus précise à notre connaissance est la suivante [13] (*in ref.* Sec. 3, Eq. 20) :

$$\beta = 1.2 (f + 2.15)^{0.90} \quad (2.54)$$

La figure 2.18 montre l'adéquation de ces deux dernières formules avec l'évaluation numérique par COMSOL<sup>®</sup> du renforcement de champ au sommet en fonction du facteur d'aspect des pointes. Il est important de noter que pour atteindre des renforcements similaires à la géométrie hémisphéroïde, le facteur d'aspect de la géométrie sphère-sur-cylindre doit être quasiment un ordre de grandeur plus élevé. Cela s'explique par le rayon de courbure  $r_C$ , qui est constant pour le cas sphère-sur-cylindre et vaut  $R_s$  tandis qu'il est variable pour l'hémisphéroïde et a pour valeur maximal  $r_C = H/f^2$  au sommet (*cf.* Eq. 2.42). Rappelons que l'accroissement de la courbure amplifie justement l'effet de pointe.

Enfin, la figure 2.19 montre la diminution du renforcement de champ au sommet des géométries sphères-sur-cône pour les faibles angles de cône  $\alpha$ . Si la perte relative de  $\beta$  peut paraître faible (quelques % au maximum), il faut rappeler que cette diminution se répercutera de manière amplifiée sur la densité de courant, qui varie en  $F^2 \exp(1/F)$ .

### Circulation du courant

L'émission à la surface de l'émetteur induit la circulation d'un courant. En effet, la conservation de la charge doit être satisfaite à tout temps à l'intérieur de la cathode :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (2.55)$$

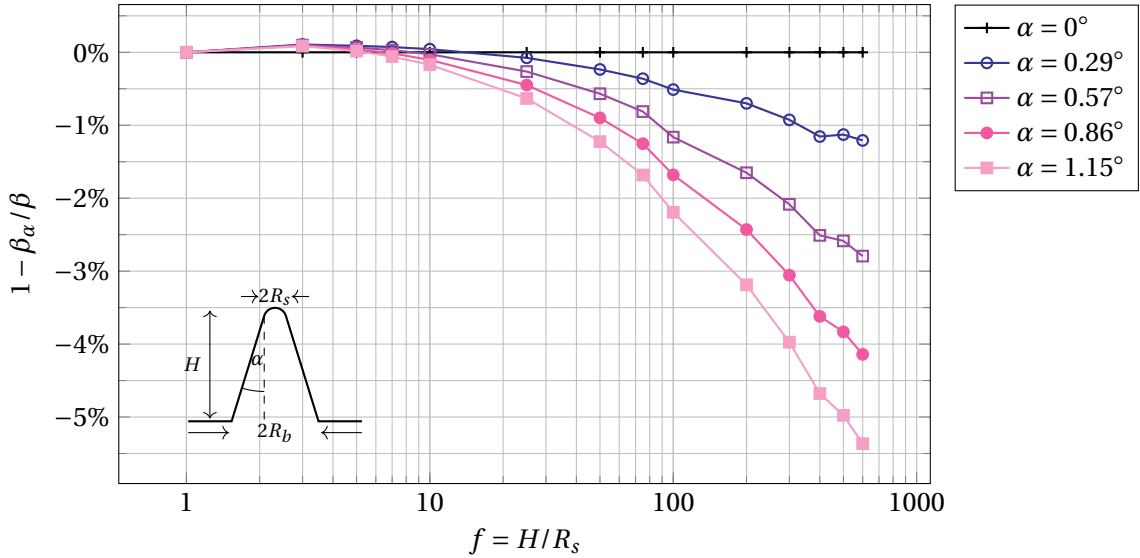


FIGURE 2.19 – Réduction du renforcement de champ au sommet des géométries sphère-sur-cône ( $\beta_\alpha$ ) par rapport aux géométries sphère-sur-cylindre ( $\beta$ ), pour de faibles angles de cône  $\alpha$ .

avec  $\vec{j}$  la densité de courant, que l'on peut écrire sous la forme d'un gradient de potentiel :

$$\vec{j} = \left( \sigma(T) + \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \vec{\nabla} V_{\text{cat}} \quad (2.56)$$

où  $\sigma$  est la conductivité électrique, prise dépendante de la température (cf. Annexe H). Par ailleurs,  $V_{\text{cat}}$  dénote le potentiel à l'intérieur de la cathode (par opposition à  $V_{\text{vac}}$  dans l'enceinte sous vide), et son gradient est relié à l'émission électronique. L'équation résultant des deux précédentes (Eq. 2.55 et Eq. 2.56) est résolue avec les conditions aux limites suivantes :

$$V_{\text{cat}}|_{L_{\text{cat}}} = V_{\text{app}}, \quad \vec{j}|_{\Sigma} \cdot \vec{n} = J(F, T, \varphi), \quad \vec{j}|_{\pm L_x}^{\pm L_y} \cdot \vec{n} = 0, \quad (2.57)$$

Remarquons que l'équation 2.56 prédit que le courant émis depuis la surface  $\Sigma$  induit une perte de tension le long de l'axe de l'aspérité, de sorte que  $V_{\text{cat}}|_{\text{apex}} < V_{\text{cat}}|_{L_{\text{cat}}}$ . Cette perte est amplifiée en régime de fort courant, et lorsque la conductivité électrique du matériau est particulièrement faible. C'est par exemple le cas pour les émetteurs de carbone [14]. En revanche, pour la plupart de nos simulations où nous utilisons les conductivités électriques de métaux (titane, tungstène, tantale, etc.) la conductivité est de l'ordre de  $10^6 - 10^7 \text{ S/m}$ . Par ailleurs, la distance interélectrodes  $D_{\text{gap}}$  étant fixée à  $200 \mu\text{m}$ , les tensions appliquées dans nos simulations sont aux alentours de 10 à 100 kV. La perte de tension relative du fait de l'émission est donc complètement négligeable, de l'ordre de  $10^{-6}$  :

$$\frac{V_{\text{cat}}|_{\text{apex}} - V_{\text{app}}}{V_{\text{app}}} \sim 10^{-6} \Rightarrow V_{\text{cat}}|_{\text{apex}} \lesssim V_{\text{app}} \quad (2.58)$$

Pour cette raison, il n'y a pas besoin de tenir compte de cette perte de tension dans la résolution de l'électrostatique : on peut conserver  $V_{\text{vac}}|_{\Sigma} = V_{\text{app}}$  sur toute la surface de la cathode, comme détaillée dans la sous-section précédente.

### Transferts thermiques

La circulation du courant induit un chauffage par effet Joule dans l'émetteur, auquel s'ajoute un flux de chaleur Nottingham à la surface d'émission. L'évolution des échanges de chaleur dans la cathode est décrite par l'équation de la chaleur :

$$\rho(T)c(T) \frac{\partial T}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi} = \frac{j^2}{\sigma(T)} \quad (2.59)$$

avec  $\vec{\phi} = -\lambda(T) \vec{\nabla} T$

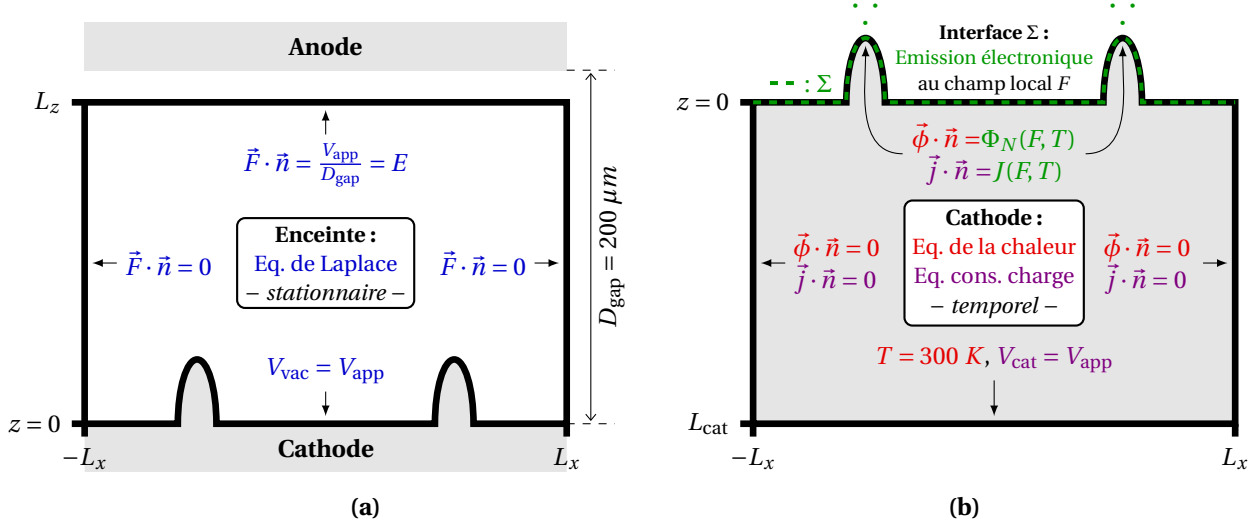


FIGURE 2.20 – Conditions aux limites – coupe 2D le long de l'axe  $x$ . (a) : Résolution de l'équation de Laplace dans l'enceinte sous vide. (b) : Résolution des équations couplées de la chaleur et de la conservation de la charge dans la cathode. L'émission électronique et l'effet Nottingham sont utilisés comme conditions aux limites à l'interface métal-vide avec les valeurs du champ local  $F$  déterminés par l'équation de Laplace. Les schémas ne sont pas à l'échelle.

avec  $T$  la température,  $\vec{\phi}$  le flux de chaleur associé,  $\rho$ ,  $c$ ,  $\lambda$  et  $\sigma$  respectivement la masse volumique, la chaleur spécifique, la conductivité thermique et la conductivité électrique de la cathode, tous pris dépendant de la température (cf. Annexe H).

Le volume de la cathode est supposé suffisamment important pour agir comme un thermostat au-delà de  $L_{\text{cat}}$ . À l'interface  $\Sigma$ , on impose un flux de chaleur égal à l'effet Nottingham  $\Phi_N$ . Sur les frontières latérales, on fixe une nouvelle fois des conditions de symétrie von Neumann :

$$T|_{L_{\text{cat}}} = 300 \text{ K}, \quad \vec{\phi}|_{\Sigma} \cdot \vec{n} = \Phi_N(F, T, \varphi), \quad \vec{\phi}|_{\pm L_x}^{\pm L_y} \cdot \vec{n} = 0, \quad (2.60)$$

Remarquons qu'à la surface de l'émetteur, aucune perte de chaleur par radiation n'est prise en compte. Pour justifier cette hypothèse, on peut faire un rapide calcul d'ordre de grandeur. Sur notre gamme d'intérêt, on peut obtenir une estimation haute à partir de l'expression du rayonnement d'un corps noir. En utilisant nos résultats de simulation pour des pointes de hauteur micrométrique, on trouve :

$$10^{-4} < \frac{\iint \sigma_* T^4|_{\Sigma} dS}{\iint \vec{\phi} \cdot \vec{n}|_{z=0} dS} < 10^{-3} \quad (2.61)$$

où  $\sigma_* = 2\pi^5 k_B^4 / 15h^3 c^2$  est la constante de Stefan-Boltzmann (à ne pas confondre avec la conductivité  $\sigma$ ) dont le calcul fait intervenir la célérité de la lumière dans le vide  $c$  (à ne pas confondre avec la chaleur spécifique  $c$ ).

L'ensemble des conditions aux limites données jusqu'ici sont récapitulées sur la figure 2.20.

### Résolution temporelle autocohérente

Une fois l'électrostatique résolue dans l'espace interélectrodes sous COMSOL<sup>®</sup>, la connaissance du champ électrique à la surface de l'émetteur permet de déterminer la densité de courant émis. À partir de là, l'évolution de l'émission (via l'autoéchauffement) est déterminée par la résolution couplée à chaque pas de temps des équations de la chaleur et du courant. Cette résolution est autocohérente en ce sens qu'à chaque pas de temps, l'actualisation des effets Joule et Nottingham impacte l'évolution de la température, qui impacte l'évolution du courant et donc les effets Joule et Nottingham au pas de temps suivant, jusqu'à atteindre un régime permanent. La figure 2.21 récapitule le



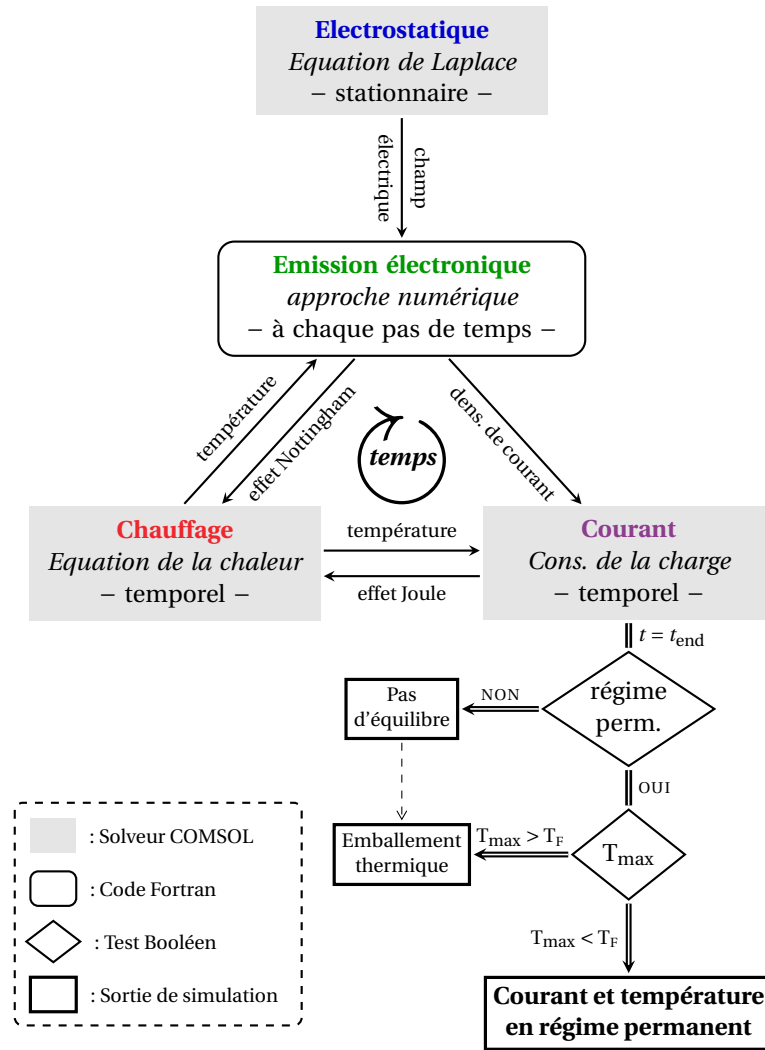


FIGURE 2.21 – Diagramme récapitulatif du déroulement d’une simulation complète.  $T_F$  est la température de fusion de l’émetteur. Les effets de charge d’espace sont négligés, et le champ à la surface de l’émetteur est obtenu comme solution de l’équation de Laplace.

déroulement de nos simulations jusqu’au dernier pas de temps. Si la température atteinte en régime permanent est supérieure à la température de fusion du matériau, d’autres phénomènes physiques (détaillés au chapitre 1, sous-section 1.3) qui ne sont pas décrits par notre modèle causeraient la destruction thermique de l’émetteur et il ne faut donc pas considérer que l’équilibre atteint est réellement stable. Il est aussi possible qu’aucun régime permanent ne puisse être atteint avec les paramètres donnés. Cela signifie soit que la durée simulée est trop courte, soit que l’émission est instable pour les paramètres donnés.

Précisons enfin que pour capter correctement l’enchaînement des différents phénomènes physiques avec des échelles de temps très éloignées (établissement du courant, montée en température et diffusion de la température) nous imposons une résolution temporelle suivant une échelle logarithmique, avec environ dix pas de temps par décade pour les résolutions non spécifiques, qui peut être raffinée selon le phénomène étudié pour capter un instant spécifique. Les temps initiaux et finaux sont fixés en fonction de la taille de l’émetteur. Pour un émetteur hémioïsoïde de  $10 \mu\text{m}$  de hauteur, nos simulations vont typiquement de la nanoseconde à la seconde.

### 2.3.3 Maillage et puissance de calcul

La principale difficulté des simulations temporelles en 3D est qu’elles requièrent une importante puissance de calcul sur un temps long. Ces deux aspects dépendent en fait essentiellement de la fi-

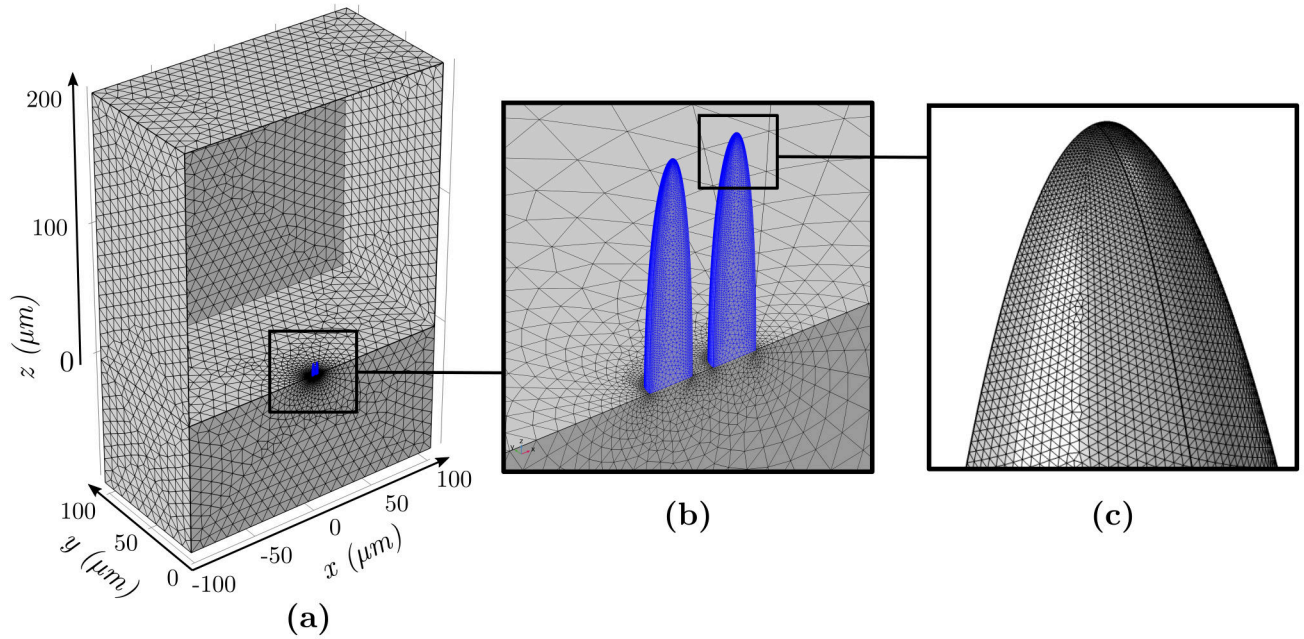


FIGURE 2.22 – Visualisation du maillage de base retenu pour nos simulations 3D avec des hémipellipsoïdes, ici présenté dans le cas de deux pointes identiques de hauteur  $H = 10 \mu m$  et de facteur d'aspect  $f = 10$ . **(a)** : vision d'ensemble du domaine de simulation, tronqué en deux le long du plan  $(x, z)$  passant par  $y = 0$ . **(b)** : zoom sur les deux pointes. **(c)** : zoom sur le sommet d'une des deux pointes. Paramètres de mailles sous COMSOL® :  $h_{\max} = H$ ,  $h_{\min} = 10^{-4}H$ ,  $h_{\text{grad}} = 1.2$  et  $h_{\text{curve}} = 0.07$ . Seules sont visibles les mailles 2D (triangles) à la surface des frontières, définies par les points d'accroche des mailles 3D (tétraèdres). Le maillage complet consiste en  $1.7 \times 10^6$  tétraèdres.

nesse du maillage de l'espace 3D. Tous les résultats numériques présentés dans cette thèse ont été obtenus sur une station de travail dotée de 32 Go de RAM et d'un processeur Intel i3-4150 cadencé à 3.5 GHz. Il était donc primordial de recourir à une méthode d'éléments finis adaptative pour pouvoir affiner le maillage uniquement dans les régions pertinentes. Le logiciel COMSOL® intègre un générateur d'éléments finis adapté à cette fin, ajustable par le biais de différents paramètres. Les principaux paramètres sont la taille minimale  $h_{\min}$  et maximale  $h_{\max}$  des éléments, le taux de croissance maximum entre deux éléments voisins  $h_{\text{grad}}$  et le facteur de courbure autour des frontières courbes  $h_{\text{curve}}$ . Ce dernier paramètre est en fait le rapport entre la taille de l'élément à la frontière et le rayon de courbure à cette position.

En ajustant ces quatre paramètres, on peut obtenir un maillage extrêmement précis au sommet et dans les pointes – là où la physique de l'émission et de l'autoéchauffement a lieu – et autoriser une précision plus grossière loin de la pointe. L'annexe G propose une rapide étude de l'influence de ces paramètres sur la précision du champ et l'impact sur le courant, par le biais d'une comparaison avec des résultats numériques 2D axisymétrique. C'est sur la base de cette étude que nous avons déterminé notre maillage de référence en 3D pour les pointes hémipellipsoïdes :  $h_{\max} = H$ ,  $h_{\min} = 10^{-4}H$ ,  $h_{\text{grad}} = 1.2$  et  $h_{\text{curve}} = 0.07$ . Avec ces paramètres, le maillage est responsable d'une incertitude entre 1 et 2% sur le courant. La figure 2.22 montre un exemple de ce raffinement de maillage pour deux émetteurs.

À titre d'exemple, pour cette configuration typique, en prenant dix pas de temps par décade sur 5 décades (de  $10^{-9}$  à  $10^{-3}$  s) pour la solution temporelle, la résolution complète s'étend sur une durée de l'ordre de l'heure. Ce temps peut être réduit en mettant à profit les plans de symétrie éventuels (pointes identiques), ou très fortement rallongé si le nombre de pointes augmente (au-delà d'un certain nombre d'éléments, la puissance d'une simple station de travail n'est plus suffisante).

Notons enfin que pour les émetteurs sphères-sur-cône, le rayon de courbure étant constant sur

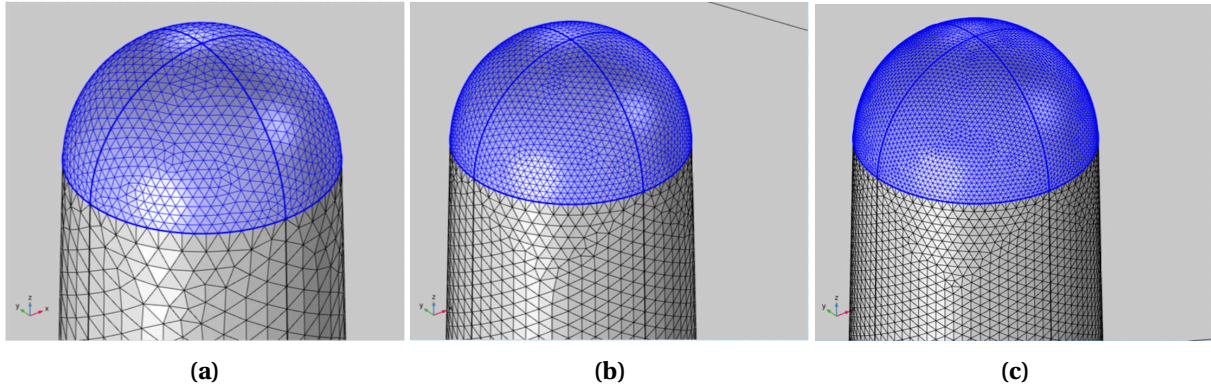


FIGURE 2.23 – Différents raffinements de maillage en 3D pour des émetteurs de forme sphère-sur-cône. Seules sont montrées les mailles 2D (triangles) à la surface de l'émetteur, définies par les points d'accroche des mailles 3D (tétraèdres). (a) :  $2000 \pm 1\%$  triangles à la surface de la sphère (en bleu). (b) :  $4000 \pm 1\%$  triangles à la surface de la sphère. (c) :  $8000 \pm 1\%$  triangles à la surface de la sphère.

toute la sphère, nous avons suivi un autre protocole de maillage. L'idée est dans ce cas de contrôler la finesse du maillage en imposant le nombre d'éléments à la surface des demi-sphères, comme le montre la figure 2.23. Le nombre d'éléments que l'on impose dépend alors du nombre de pointes que l'on simule afin de trouver le meilleur compromis entre précision et temps de calcul.

## 2.4 Perspectives d'amélioration du modèle

Les précédentes sections ont présenté en détail l'intégralité des ingrédients de notre modèle, sans toutefois les remettre systématiquement en perspective avec la littérature. Par conséquent, nous détaillons ici les hypothèses simplificatrices et discutons quelques perspectives d'amélioration pour des travaux futurs. Certaines parties de cette section s'appuient sur le deuxième chapitre d'un livre en cours de rédaction par les encadrants de cette thèse et qui s'intitule *Theoretical Treatment of Electron Emission and Related Phenomena*, à paraître chez Springer Nature. En particulier, les calculs de coefficient de transmission par la méthode Numerov présentés ici ont été réalisés par Philippe Teste dans le cadre de la rédaction de ce livre.

### 2.4.1 Au-delà de la théorie de Sommerfeld

Commençons avec la principale simplification de notre modèle : la théorie de Sommerfeld. Il existe en fait deux éléments principaux qui limitent sa généralité.

Premièrement, la théorie de Sommerfeld ignore la structure de bandes des matériaux. En l'absence de bandes d'énergie interdites, la surface de Fermi (la surface d'énergie constante égale à  $\epsilon_F$  dans l'espace des impulsions  $\vec{k}$ ) est une sphère de rayon  $k_F = \sqrt{2m(\epsilon_F - \epsilon_C)}/\hbar$ . C'est une très bonne description pour les métaux alcalins comme le rubidium (Fig. 2.24a) et plutôt correcte pour quelques autres métaux comme l'argent, l'or et le cuivre (Fig. 2.24b). Les calculs plus complets de LCAO (approximation par combinaison linéaire d'orbitales atomiques ou *Linear Combination of Atomic Orbital approximation* en anglais) qui prennent en compte la structure de bande prédisent pour ces métaux une densité d'états accessibles assez proches des prédictions de Sommerfeld [15].

Pour d'autres métaux en revanche comme le tungstène et le titane que nous étudions dans cette thèse, les états accessibles se répartissent sur plusieurs bandes d'énergie et la surface de Fermi n'est plus du tout sphérique (Fig. 2.24c). Prendre en compte la structure de bande permettrait dans ces cas de mieux décrire la densité d'états disponibles, qui intervient dans le calcul de la fonction d'apport et donc *in fine* sur le courant émis.

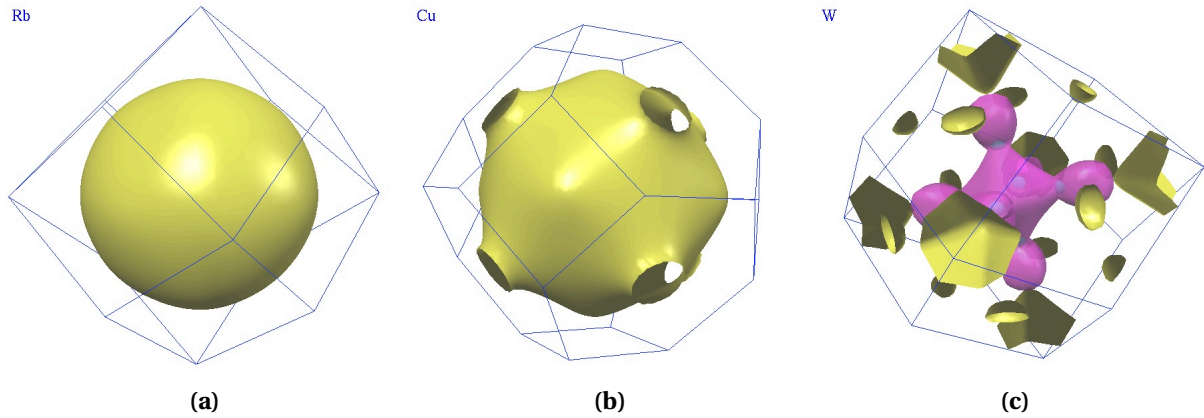


FIGURE 2.24 – Représentation de la surface de Fermi dans l'espace réciproque pour différents métaux. (a) : Le rubidium (Rb). (b) : Le cuivre (Cu). (c) : Le tungstène (W). Les couleurs définissent la bande d'énergie à laquelle appartiennent les états correspondants. Crédit des images : Université de Floride (*Fermi Surface Database*).

Deuxièmement, le modèle de Sommerfeld n'est valide que tant que l'émetteur est suffisamment large [16] pour permettre une description continue des niveaux d'énergie. À l'échelle nanométrique, les niveaux d'énergie ne forment plus un continuum et doivent être pris en compte de manière discrète pour le calcul de la densité d'états accessibles (discontinuité de la fonction d'apport). À titre d'exemple, la différence entre deux niveaux d'énergie pour un émetteur à l'échelle micrométrique est d'environ  $10^{-6} eV$ , tandis qu'elle monte à  $1 eV$  pour une taille de l'ordre du nanomètre, ce qui rend le concept de bande de conduction totalement inopérant. Il serait ainsi intéressant de considérer l'intégration de cette discontinuité des niveaux d'énergie pour la modélisation de l'émission de champ depuis les nanostructures de carbone présentées au chapitre 6, pour qui le rayon au sommet est de l'ordre d'une vingtaine de nanomètres seulement.

Par ailleurs, si la théorie de Sommerfeld décrit assez bien les propriétés en volume de certains métaux, les effets de surface sont en revanche négligés. La méthode de la charge image permet d'approximer le potentiel à proximité de l'interface, mais ne dit rien sur le potentiel à l'intérieur du métal (la barrière de Schottky-Nordheim ainsi formée nécessite d'ailleurs d'imposer de manière artificielle une continuité au niveau du bas de bande de conduction  $\epsilon_C$ ). Ainsi, la théorie de Sommerfeld ne dit rien sur la profondeur du puits de potentiel à l'intérieur du métal. C'est pourquoi  $\epsilon_C$  n'est pas un résultat du modèle, mais une entrée provenant de résultats d'expériences, intimement relié à la densité volumique d'électrons de conduction et au potentiel chimique du matériau.

### 2.4.2 Meilleure modélisation de l'interface métal/vide

Pour mieux modéliser l'interface métal/vide, il faudrait dans l'idéal avoir un modèle renseignant la position de tous les électrons de conduction, et déduire de cette distribution de charge le potentiel associé, éventuellement en dynamique du fait de l'agitation thermique ou d'une émission électronique. Le traitement autocohérent des équations couplées de Schrödinger et Poisson constitue un bon compromis pour se rapprocher d'une telle description.

L'approche usuelle est alors d'utiliser la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT pour *Density Functional Theory* en anglais) [17, 18]. L'idée centrale de ce formalisme est de reformuler le problème quantique à  $N$  corps en un problème à un seul corps, en substituant la densité électronique  $n_e(\mathbf{z})$  à la fonction d'onde décrivant les  $N$  électrons. La DFT suppose que l'énergie totale du problème multicorps en interaction peut être exprimée par une unique fonctionnelle de la densité. Les modèles les plus simples de DFT négligent généralement les détails de la structure ionique qui constitue le réseau et supposent que les ions constituent un potentiel statique constant et attractif dans lequel sont piégés les électrons de conduction. C'est le modèle du *jellium*. Pour calculer la densité électronique

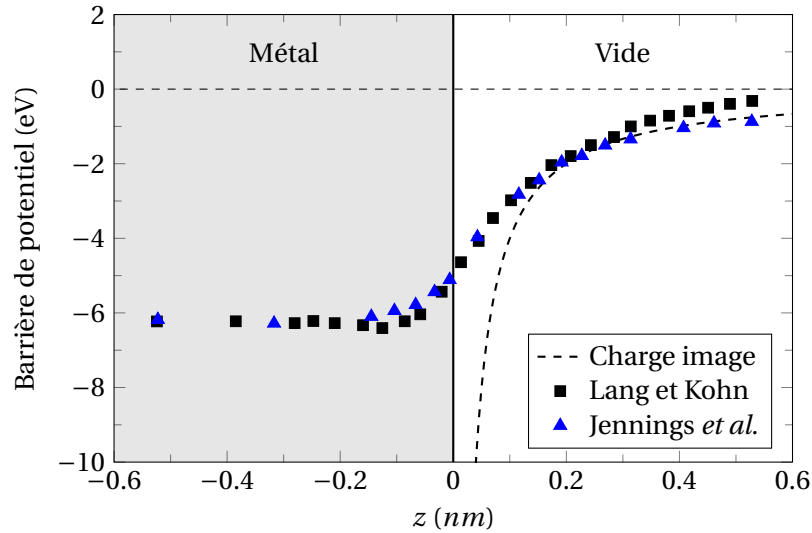


FIGURE 2.25 – Comparaison avec la barrière de Schottky-Nordheim (charge image) de la barrière de potentiel calculée par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), avec un rayon de Wigner-Seitz  $r_S = 2 \text{ \AA}$ . (références dans le texte).

dans le cadre de ce modèle, il faut alors déterminer le nombre d'électrons de conduction mis en jeu par chaque ion. Ce paramètre est défini par le biais du rayon de Wigner-Seitz  $r_S$  qui correspond au rayon d'une sphère dont le volume serait égal au volume moyen par électron de conduction dans le solide, défini par la relation :

$$\frac{4}{3}\pi r_S^3 \bar{n}_e = 1 \quad (2.62)$$

où  $\bar{n}_e$  est la densité moyenne d'électrons de conduction dans le métal considéré. La formulation mathématique de la DFT permet alors de déterminer à n'importe quelle position (aussi bien à l'intérieur qu'en dehors du métal) la densité d'électrons et le potentiel effectif ressenti par les électrons. On obtient ainsi une description plus fine où la barrière de potentiel autour de l'interface dépend des propriétés du métal.

### En l'absence de champ extérieur

En utilisant ce formalisme en l'absence de champ extérieur, Lang et Kohn [18] ont dérivé une forme de barrière à proximité de l'interface métal vide décrivant naturellement le bas du puits de potentiel, comme le montre la figure 2.25 pour un rayon de Wigner-Seitz  $r_S = 2 \text{ \AA}$  (carrés noirs). Il faut toutefois noter qu'à longue distance de l'interface, la barrière de potentiel s'écarte de la forme usuelle de Schottky-Nordheim (courbe noire en tiret). C'est pourquoi Jennings *et al.* [19] ont ensuite proposé d'étendre le résultat de Lang en imposant de retrouver la forme classique à longue distance (triangles bleus). La barrière ainsi obtenue offre une bonne description du potentiel à l'intérieur du métal et loin de l'interface.

### Avec un champ extérieur

Si la modélisation de la forme du potentiel à l'intérieur du métal influence la valeur de la fonction d'apport, c'est la forme de la barrière dans le vide, juste devant l'interface qui est la plus déterminante puisque c'est de l'épaisseur de cette barrière que va dépendre la probabilité de transmission par effet tunnel. La DFT peut aussi permettre de mieux modéliser la barrière de potentiel en présence d'un champ électrique extérieur, avec des implications non négligeables dans le calcul de la densité de courant.

On peut citer en particulier les travaux de Gohda *et al.* [20, 21]. Sans entrer dans les détails du calcul autocohérent de la barrière, il est intéressant de comparer la barrière obtenue avec celle de

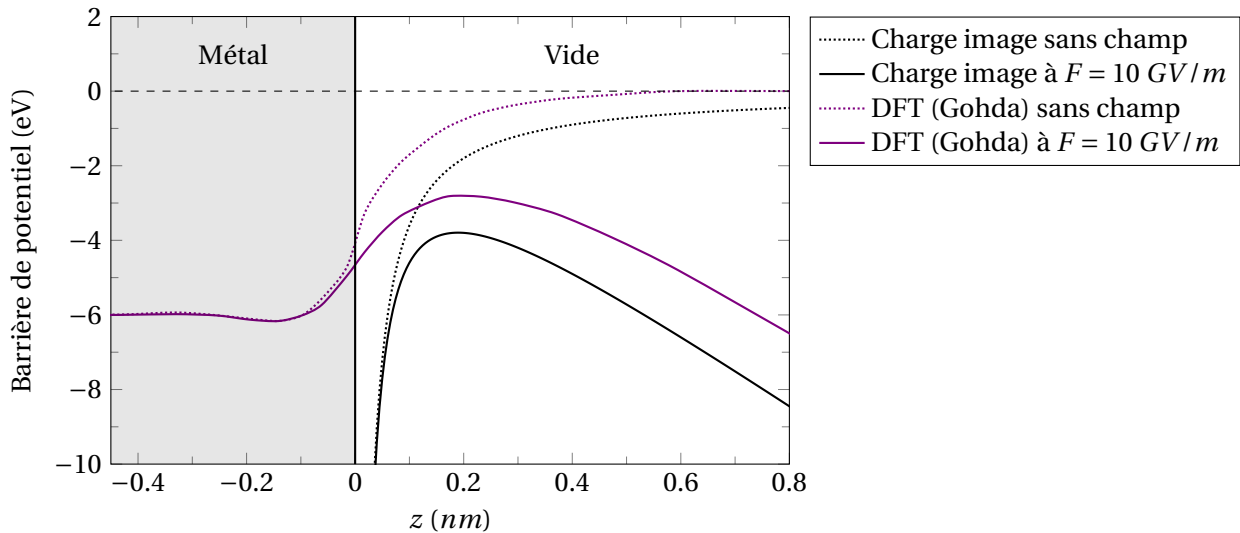


FIGURE 2.26 – Comparaison de la barrière de potentiel obtenue par résolution autocohérente des équations de Schrödinger et Poisson via la méthode de la fonctionnelle de la densité avec  $r_s = 2.1 \text{ \AA}$  [20] (courbes violettes) par rapport à la simple prise en compte de la charge image (courbes noires).

Schottky-Nordheim. La figure 2.26 compare ces deux barrières en l'absence (courbes en pointillé) et en présence (courbes pleines) d'un champ électrique extérieure de  $10 \text{ GV/m}$  (courbes pleines). En présence d'un champ extérieur, la position du maximum de la barrière de potentiel reste inchangée, mais on note une différence d'amplitude de  $0.9 \text{ eV}$ . Une telle différence a une conséquence non négligeable sur la densité de courant émise, à laquelle s'ajoute une épaisseur de barrière accrue sur toute la gamme d'énergie normale accessible. Notons toutefois que ces calculs sur la barrière de potentiel n'intègrent pas les corrections mentionnées plus haut et proposées par Jennings *et al.* [19] pour retrouver le potentiel de la charge image loin de l'interface.

Pour le calcul du coefficient de transmission  $D(\epsilon_n, F)$ , l'absence d'une forme analytique pour la barrière de potentiel empêche de pousser plus loin le développement de l'expression D.8. Il faut alors utiliser l'outil numérique pour déterminer les zéros de l'impulsion normale et calculer cette expression (qui implique une intégrale complexe). Une autre possibilité est de se tourner vers une résolution numérique plus en amont qui applique la méthode de résolution de Numerov (décrite plus en détail dans la sous-section 2.4.3) à l'équation différentielle de Schrödinger. En procédant ainsi, on obtient le coefficient de transmission montré sur la figure 2.27 (courbe violette). On voit que l'augmentation du sommet de la barrière et son épaissement décale largement la transmission aux énergies normales plus élevées. Cet écart dans le coefficient de transmission donnerait une densité de courant 2 à 3 fois plus faible pour un travail de sortie entre  $-3$  et  $-2 \text{ eV}$  (ce qui est déjà notable) mais pourrait aller jusqu'à une différence de quelques ordres de grandeurs pour une émission en deçà de  $-4 \text{ eV}$ .

Cet exemple précis illustre bien la grande incertitude sur la prédiction du courant liée aux hypothèses même des modèles d'émission électronique. C'est la raison principale pour laquelle cette thèse s'attache plus à révéler des tendances et des comportements relatifs qu'à comparer directement les valeurs théoriques obtenues aux mesures expérimentales.

### Influence d'un rayon de courbure nanométrique

Un autre aspect susceptible d'impacter de manière notable la forme de la barrière de potentiel est la valeur du rayon de courbure à la surface émettrice. En effet, l'expression usuelle de Schottky-Nordheim (*cf.* Eq. 2.17) n'est théoriquement valide que pour les surfaces planes. Dans les faits, il suffit que le rayon de courbure soit très grand devant l'épaisseur de la barrière de potentiel. Différents auteurs se sont intéressés à l'émission d'électrons pour des émetteurs à très faible rayon de courbure [22, 23]. Plus récemment, Kyritsakis *et al.* [24] ont étudié l'effet d'une géométrie parfaitement sphérique dans le cadre de la méthode de la charge image. En résolvant l'équation de Laplace directement

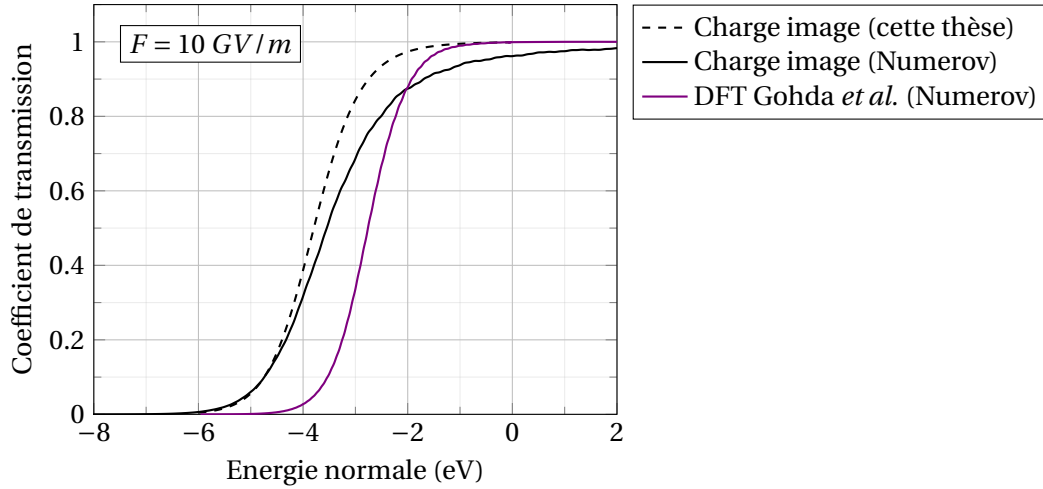


FIGURE 2.27 – Comparaison du coefficient de transmission à travers les barrières de potentiel présentées sur la figure 2.26 à  $10 \text{ GV/m}$ . Une différence est faite entre l'utilisation d'une méthode BKW 1D parabolique (cette thèse, courbes en tirets) et l'utilisation d'une méthode de résolution numérique type Numerov (courbe pleine) pour le calcul du coefficient de transmission à travers la barrière de Schottky-Nordheim. Le calcul du coefficient de transmission à travers la barrière de potentiel déterminée par Gohda *et al.* (courbe violette) utilise la méthode de Numerov.

en coordonnées sphériques, ils ont obtenu par développement limité l'expression suivante de la barrière de potentiel :

$$\mathcal{E}(z) = \frac{-e^2}{16\pi\epsilon_0 z \left(1 + \frac{z}{2r_C}\right)} + \frac{eFz^2}{r_C} - eFz, \quad (2.63)$$

où  $r_C$  est le rayon de courbure et  $F$  l'amplitude du champ électrique à  $z = 0$ . La figure 2.28 montre la modification de la barrière qui en résulte à 2 et  $10 \text{ GV/m}$  pour  $r_C = 20 \text{ nm}$  (le plus petit rayon de courbure exploré dans cette thèse) et  $r_C = 5 \text{ nm}$ . Si la modification n'a que très peu d'influence sur le sommet de la barrière, on voit qu'un rayon de courbure plus faible tend à accroître son épaisseur, en particulier aux énergies normales bien inférieures à son sommet. Cela a pour conséquence de réduire la transmission par effet tunnel aux faibles énergies normales, comme on l'observe sur les courbes du coefficient de transmission de la figure 2.29. Dès que le rayon dépasse la cinquantaine de nanomètres en revanche, la correction liée au rayon de courbure devient négligeable. Prendre en compte la réduction du courant qui en découle nécessite cependant d'adapter le développement analytique de l'annexe D pour la nouvelle forme de barrière de l'équation 2.63, ou d'utiliser directement une méthode de résolution de type Numerov de l'équation de Schrödinger, comme on l'a fait pour les courbes de la figure 2.28.

### Intégration de la charge d'espace en régime d'émission intense

Enfin, pour ne pas avoir à recalculer la forme de la barrière de potentiel au cours de l'émission, notre modèle ne résout pas l'équation de Poisson, mais seulement celle de Laplace. Il ne prend donc pas en compte la possible influence de la charge d'espace. Si l'hypothèse d'une charge d'espace négligeable est réaliste pour les densités de courant faibles à modérées, il doit exister une densité de courant seuil au-delà de laquelle la densité volumique de charge dans l'espace interélectrodes devient suffisante pour réduire le champ local à la surface de la pointe.

Expérimentalement, on observe une saturation du courant au-delà d'une certaine densité. Pour un émetteur micrométrique de type Müller, Barbour *et al.* [25] ont mesuré l'apparition de cette saturation pour des densités de courant entre  $10^{11}$  et  $10^{12} \text{ A/m}^2$ . Bien que la valeur de saturation dépend de la géométrie des émetteurs et de la configuration des électrodes [26, 27], cet ordre de grandeur indique que la prise en compte de la charge d'espace devrait accroître le champ électrique nécessaire

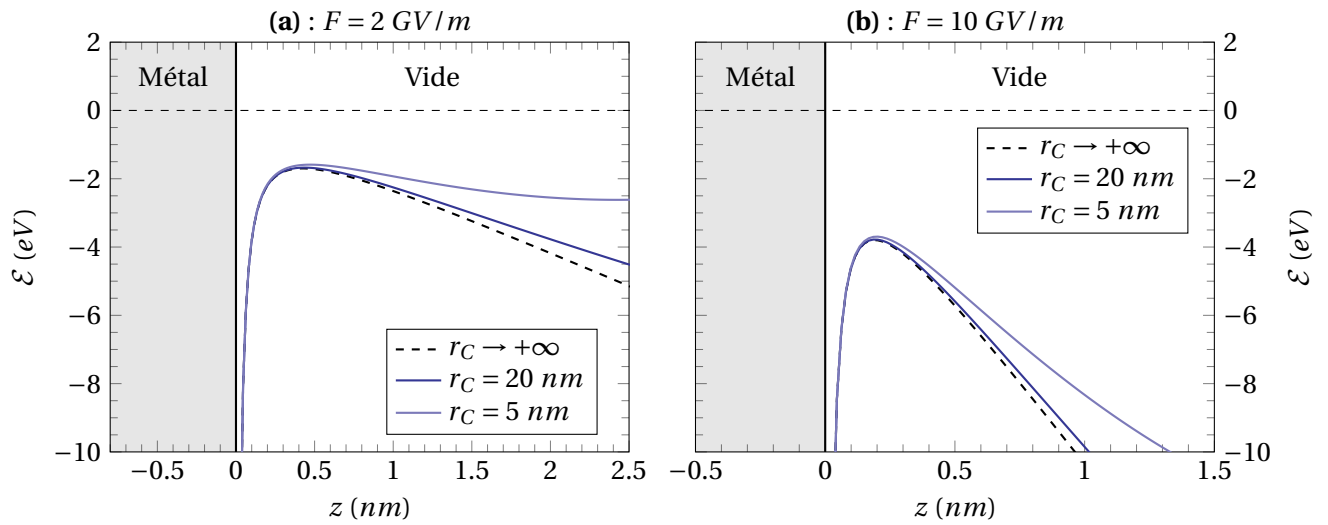


FIGURE 2.28 – Variation de la barrière de potentiel à l'interface métal/vide pour différents rayons de courbure au sommet de l'émetteur (a) : pour un champ local extérieur de  $2 \text{ GV/m}$  et (b) : pour un champ local extérieur de  $10 \text{ GV/m}$ .

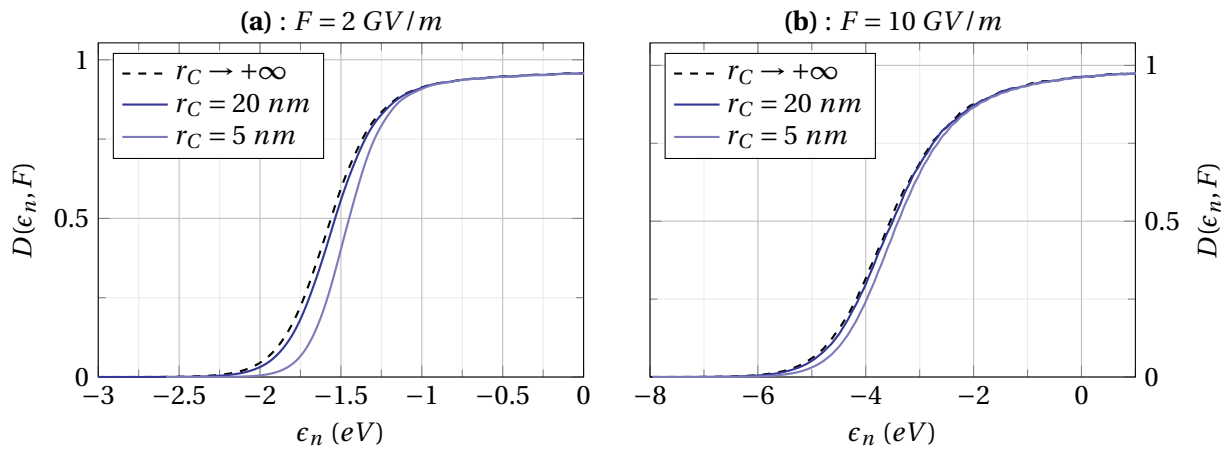


FIGURE 2.29 – Variation du coefficient de transmission  $D(\epsilon_n, F)$  à l'interface métal/vide pour différents rayons de courbure au sommet de l'émetteur (a) : pour un champ local extérieur  $F = 2 \text{ GV/m}$  et (b) : pour un champ local extérieur de  $F = 10 \text{ GV/m}$ .



pour atteindre les régimes d'émission intense étudiés dans cette thèse et permettant d'étudier des situations de fort autoéchauffement.

Ceci étant dit, la charge d'espace complexifie grandement le modèle d'émission puisqu'il faut alors résoudre de manière temporelle l'équation de Poisson et pouvoir estimer la densité d'électrons dans l'espace interélectrodes. Différentes approches ont été développées dans cette optique. Au-delà de l'expression analytique de Child-Langmuir (1D), la méthode la plus usuelle est l'utilisation de modèles PIC (pour *Particle in Cells* en anglais). Cette méthode est très appropriée pour étudier les plasmas et simuler les trajectoires d'un grand nombre de particules chargées [28]. La méthode PIC considère en fait un nombre réduit de superparticules qui représentent la trajectoire statistique d'une quantité  $w$  de particules réelles, le paramètre  $w$  étant le "poids" de cette superparticule. Ce poids est ensuite utilisé dans le terme source de l'équation de Poisson pour déterminer la charge d'espace. Les simulations PIC restent très exigeantes en puissance de calcul.

C'est la raison pour laquelle Zhu et Ang [29, 30] ont développé une approche simplifiée qui consiste à résoudre de manière autocohérente l'équation de Poisson et l'équation du mouvement d'un électron unique pour converger vers une nouvelle distribution volumique de charge à chaque pas de temps. L'intégration de la charge d'espace à notre modèle d'émission par le biais d'une telle méthode a récemment été étudiée par notre équipe [31] et pourra permettre de raffiner au cours de futurs travaux les résultats présentés dans la suite de cette thèse.

### 2.4.3 Au-delà de l'approximation BKW

Pour dépasser l'approximation BKW, différentes méthodes de résolution numérique de l'équation aux valeurs propres 2.20 ont été explorées. On peut citer l'utilisation du formalisme de la matrice de passage [32], d'une méthode de résolution perturbative [33] ou de schémas numériques de différentiation [34, 35]. Ces méthodes numériques permettent le calcul du coefficient de transmission à travers n'importe quelle forme de barrière de potentiel, sans requérir une expression analytique.

La figure 2.30 compare à différentes valeurs de champ extérieur le coefficient de transmission obtenu par une méthode de résolution numérique de type Numerov [36, 34] avec une simple approximation BKW 1D (barrière triangulaire, courbe rouge) et une approximation BKW 1D parabolique suivant le formalisme de Good *et al.* [37, 38] (utilisé dans cette thèse, courbe noire). Notons toutefois qu'une légère différence entre la méthode de Murphy et Good et celle utilisée dans cette thèse pour le calcul du coefficient de transmission au-delà du sommet de la barrière de potentiel est précisée à la fin de l'annexe D (*cf.* Fig. D.3).

Si la différence entre les approches est négligeable à faible valeur de champ électrique  $F$ , elle devient importante au-delà de  $2 \text{ GV/m}$ , en particulier dans le cas d'une émission de champ à haute température pour laquelle la contribution au courant à énergie normale proche du sommet de la barrière devient significative. Les variations du coefficient de transmission restent cependant de l'ordre de quelques dizaines de pourcents. Ainsi, ce n'est pas tant la meilleure précision offerte par ce genre de méthode qui est intéressante que plus particulièrement la possibilité qu'elle offre à considérer des barrières de potentiel plus réaliste/ modélisant mieux l'interface métal/vide (comme celle obtenue par DFT).

Toutefois ces méthodes numériques au-delà de l'approximation BKW sont plus coûteuses à mettre en place et ne permettent plus d'analyser analytiquement la contribution de chaque paramètre physique que sont la température, le champ ou le travail de sortie (*cf.* les formules analytiques E.3, E.8 et E.10). C'est la raison pour laquelle, n'ayant pas considéré de forme de barrière différente de celle de Schottky-Nordheim, nous nous sommes contentés d'une résolution de type BKW 1D parabolique.

### 2.4.4 Variation du travail de sortie et forme des émetteurs/aspérités

Un dernier aspect de la réalité expérimentale qui est simplifié dans notre modèle concerne le travail de sortie à la surface des pointes émettrices et leur géométrie. La forme de ces pointes est supposée lisse, régulière et axisymétrique, avec un travail de sortie constant sur toute la surface de l'émetteur (pris égal à une valeur moyenne polycristalline).

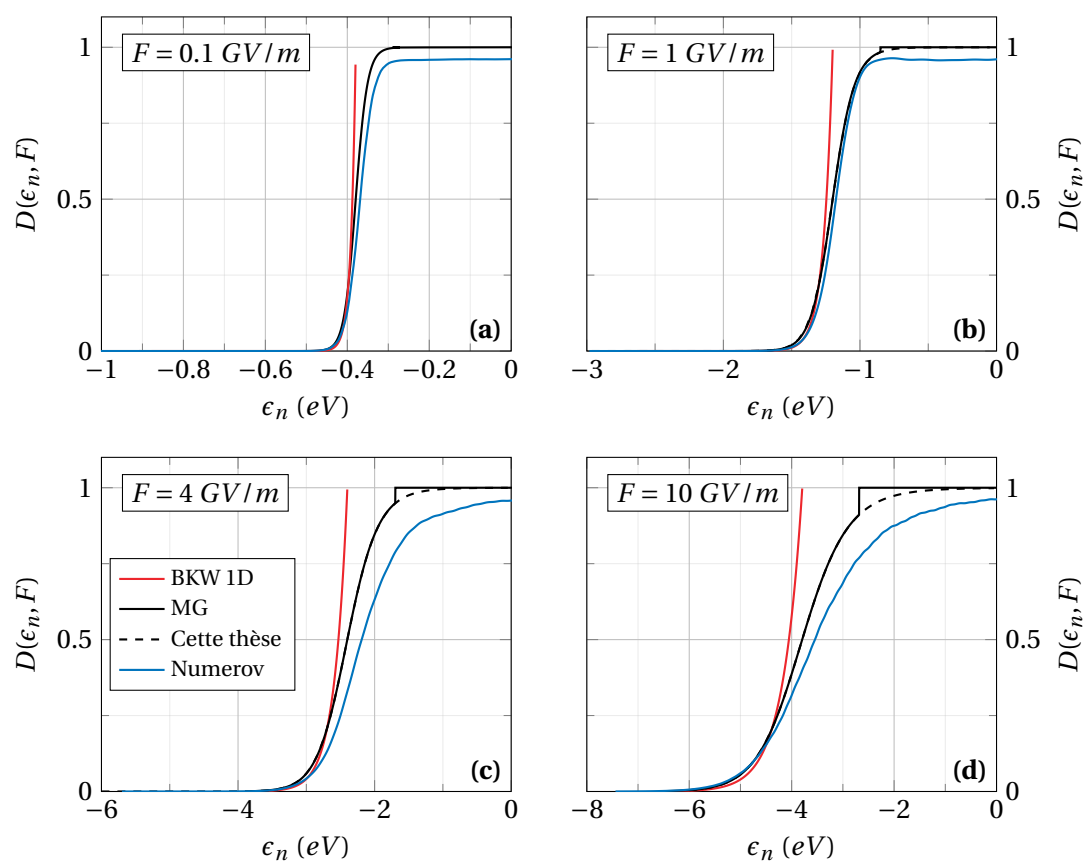


FIGURE 2.30 – Comparaison du coefficient de transmission au travers d'une barrière triangulaire (BKW 1D) ou Schottky-Nordheim pour différentes amplitudes de champ extérieur en fonction de la méthode de calcul utilisée. MG désigne la méthode développée par Murphy et Good, basé sur une approximation BKW 1D parabolique (barrière Schottky-Nordheim).

$\varphi$ en eV (orientation cristalline)		
Cu	Mo	W
4.59 (100)	4.53 (100)	4.63 (100)
4.48 (110)	4.95 (110)	5.25 (110)
4.98 (111)	4.55 (111)	4.47 (111)
4.53 (112)	4.36 (112)	4.18 (113)

TABLE 2.2 – Mesure expérimentale du travail de sortie pour le cuivre (Cu), le molybdène (Mo) et le tungstène (W) selon l’orientation cristalline du matériau [41].

Dans la pratique en revanche, les aspérités de surfaces et même les émetteurs élaborés en laboratoire n’ont jamais des formes parfaitement régulières et leur travail de sortie varie en fonction de l’état de surface du matériau – du fait d’éventuelles adsorptions d’atomes du gaz résiduel [39] ou de l’inclusion d’impuretés [40] – et de son orientation cristallographique [41]. Par exemple, le travail de sortie varie entre 4.36 et 4.95 eV selon les plans cristallins du molybdène, et entre 4.18 et 5.25 eV pour le tungstène (cf. Tab. 2.2). En rappelant que la densité de courant extraite par émission de champ suit typiquement une loi en  $J(\varphi) \propto F^2/\varphi \exp(-C_2\varphi^{3/2}/F)$  (cf. annexe E, Eq. E.1 et E.3), on voit bien que ces variations de travail de sortie changent complètement le champ requis pour obtenir une densité de courant donnée.

De même, les imperfections de formes peuvent avoir une influence sur la distribution de champ local  $F$  au voisinage du sommet de l’émetteur comme on a pu le voir avec l’introduction d’un faible angle de cône à partir des géométries sphères sur cylindre (cf. Fig. 2.19). En fonction de la gamme d’émission, une variation de plusieurs pourcents sur le champ peut être suffisante pour induire un changement d’un ordre de grandeur sur le courant.

Dans l’optique de reproduire très fidèlement l’émission d’une surface rugueuse ou d’une assemblée d’émetteurs mesurée expérimentalement, il serait certainement nécessaire d’intégrer ce niveau de détail. La difficulté réside alors dans l’accès aux mesures locales de forme et de travail de sortie, en particulier aux échelles nanométriques.

Un travail qui regroupe bien ces deux préoccupations est celui mené par le Sandia National Laboratory. L’équipe de Moore *et al.* [42] se penche sur la possibilité d’utiliser des technologies de mesures aux échelles atomiques comme la microscopie à effet tunnel (STM en anglais pour *Scanning Tunneling Microscopy*), la microscopie à force atomique (AFM pour *Atomic Force Microscopy*), ou encore la microscopie par photoémission électronique (PEEM pour *Photoemission Electron Microscopy*) pour caractériser précisément l’état de surface d’électrodes utilisées dans des machines haute tension. L’objectif recherché est d’ensuite transférer ces résultats de mesures en entrée de simulation d’un code d’émission qui permettrait de prédire correctement la tenue haute tension de ces électrodes. Ces travaux de recherche ouvrent la voie à une compréhension accrue du phénomène de claquage induit par l’émission électronique, mais dépassent clairement le cadre théorique de cette thèse.

## 2.5 Conclusion

Ce chapitre a présenté en détail le modèle d’émission électronique sous-jacent à l’ensemble des résultats présentés dans la suite de cette thèse.

Les électrons dans le métal sont décrits dans le cadre de la théorie de Sommerfeld qui permet d’obtenir pour chaque valeur d’énergie normale accessible la densité de flux d’électrons arrivant à l’interface métal/vide (fonction d’apport). Cette interface est modélisée par une barrière de potentiel dite de Schottky-Nordheim, dont la forme est déterminée par la méthode classique de la charge image. Le coefficient de transmission des électrons à travers cette barrière est calculé en suivant le développement de Good *et al.* qui repose sur une approximation BKW 1D parabolique, formalisée dès

1935 par Kemble. La combinaison du coefficient de transmission et de la fonction d'apport permet de calculer numériquement la densité de courant émis pour n'importe quelle valeur de champ et de température. En parallèle, la description de Sommerfeld des électrons permet aussi de déterminer le bilan énergétique local entre électrons émis et électrons de remplacement, qui donne lieu à la densité de flux de chaleur Nottingham.

Ces deux quantités, la densité de courant émise et la densité de flux de chaleur Nottingham, sont ensuite utilisées comme conditions aux limites à la surface de la cathode pour une résolution multiphysique en géométrie 3D ou 2D axisymétrique à l'aide du solveur numérique commercial COMSOL<sup>®</sup>. Les simulations qui en découlent offrent une description temporelle des équations couplées de la chaleur et du courant qui permet d'étudier l'évolution de l'autoéchauffement des émetteurs par effet Joule et Nottingham au cours de l'émission par effet de champ.

Le chapitre s'est achevé sur un rappel des simplifications sous-jacentes au modèle et a présenté différentes pistes, explorées ou en cours d'exploration, pour tenter de les dépasser. L'ensemble de ces pistes constituent autant de perspectives d'amélioration de notre modèle pour de futurs travaux, dont la pertinence dépendra de l'objectif recherché.

Nous allons toutefois tâcher de montrer dans la suite de ce manuscrit qu'il est encore possible d'apporter un bon nombre de résultats nouveaux à partir du modèle présenté dans les premières sections de ce chapitre.

## Références du chapitre 2

« Des nains sur des épaules de géants »

– Bernard de Chartres, *XII<sup>e</sup>* siècle

- [1] B. SEZNEC. « Modélisation des phénomènes physiques intervenant au cours de l'émission électronique sous haute tension sous vide ». Thèse de doct. Université Paris-Saclay, déc. 2017 (cf. p. 31).
- [2] L. W. NORDHEIM. « The Effect of the Image Force on the Emission and Reflexion of Electrons by Metals ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 121.788 (1928), p. 626-639. ISSN : 0950-1207 (cf. p. 39).
- [3] Richard G FORBES. « Use of a Spreadsheet for Fowler–Nordheim Equation Calculations ». In : (1999), p. 9 (cf. p. 41).
- [4] L. M MILNE-THOMSON. « Elliptic Integrals ». In : M ABRAMOWITZ et I. A. STEGUN. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 1972. Chap. 17 (cf. p. 41).
- [5] William H. PRESS et al. *Numerical Recipes in Fortran 77*. 2nd ed. Cambridge University Press, 1996 (cf. p. 41).
- [6] L. W. SWANSON, L. C. CROUSER et F. M. CHARBONNIER. « Energy Exchanges Attending Field Electron Emission ». In : *Physical Review* 151.1 (nov. 1966), p. 327-340. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.151.327](https://doi.org/10.1103/PhysRev.151.327) (cf. p. 46).
- [7] G. N. FURSEY, D. V. GLAZANOV et S. A. POLEZHAEV. « Field emission from nanometer protuberances at high current density ». In : *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation* 2.2 (avr. 1995). Conference Name : IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, p. 281-287. ISSN : 1558-4135. DOI : [10.1109/94.388253](https://doi.org/10.1109/94.388253) (cf. p. 46).
- [8] W. B. NOTTINGHAM. « Remarks on Energy Losses Attending Thermionic Emission of Electrons from Metals ». In : *Physical Review* 59.11 (juin 1941), p. 906-907. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.59.906.2](https://doi.org/10.1103/PhysRev.59.906.2) (cf. p. 46).
- [9] Russell D. YOUNG. « Theoretical Total-Energy Distribution of Field-Emitted Electrons ». en. In : *Physical Review* 113.1 (jan. 1959), p. 110-114. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.113.110](https://doi.org/10.1103/PhysRev.113.110) (cf. p. 48).

- [10] F. M. CHARBONNIER et al. « Nottingham Effect in Field and T - F Emission : Heating and Cooling Domains, and Inversion Temperature ». In : *Physical Review Letters* 13.13 (sept. 1964), p. 397-401. ISSN : 0031-9007. DOI : [10.1103/PhysRevLett.13.397](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.13.397) (cf. p. 48, 49).
- [11] T. UTSUMI. « Vacuum Microelectronics : What's New and Exciting ». In : *IEEE Transactions on Electron Devices* 38.10 (Oct./1991), p. 2276-2283. ISSN : 00189383. DOI : [10.1109/16.88510](https://doi.org/10.1109/16.88510) (cf. p. 49, 50).
- [12] F. ROHRBACH. « Sur les mécanismes qui conduisent à la formation de l'étincelle électrique à très haute tension et sous ultra-vide par la mesure du temps de retard à la disruption ». Thèse de doct. Oct. 1971 (cf. p. 53).
- [13] Richard G FORBES, C. J EDGCOMBE et U VALDRÈ. « Some Comments on Models for Field Enhancement ». In : *Ultramicroscopy*. IFES 2001 95 (mai 2003), p. 57-65. ISSN : 0304-3991. DOI : [10.1016/S0304-3991\(02\)00297-8](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(02)00297-8) (cf. p. 53).
- [14] Eric MINOUX et al. « Achieving High-Current Carbon Nanotube Emitters ». en. In : *Nano Letters* 5.11 (nov. 2005), p. 2135-2138. ISSN : 1530-6984, 1530-6992. DOI : [10.1021/nl051397d](https://doi.org/10.1021/nl051397d). URL : <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/nl051397d> (visité le 11/03/2020) (cf. p. 54).
- [15] Neil ASHCROFT et N. David MERMIN. *Solid state Physics*. 1976. ISBN : 0-03-083993-9 (cf. p. 58).
- [16] X.Z. QIN et al. « Analytical treatment of cold field emitter emission from nanowall emitter, including quantum confinements effects ». In : *Proc. R. Soc. A* 467 (2010), p. 1029-1052. DOI : [10.1098/rspa.2010.0460](https://doi.org/10.1098/rspa.2010.0460) (cf. p. 59).
- [17] P. HOHENBERG et W. KOHN. « Inhomogeneous Electron Gas ». en. In : *Physical Review* 136.3B (nov. 1964), B864-B871. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.136.B864](https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864> (visité le 21/11/2021) (cf. p. 59).
- [18] N. D. LANG et W. KOHN. « Theory of Metal Surfaces : Charge Density and Surface Energy ». en. In : *Physical Review B* 1.12 (juin 1970), p. 4555-4568. ISSN : 0556-2805. DOI : [10.1103/PhysRevB.1.4555](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.1.4555) (cf. p. 59, 60).
- [19] P. J. JENNINGS, R. O. JONES et M. WEINERT. « Surface barrier for electrons in metals ». en. In : *Physical Review B* 37.11 (avr. 1988), p. 6113-6120. ISSN : 0163-1829. DOI : [10.1103/PhysRevB.37.6113](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.6113) (cf. p. 60, 61).
- [20] Y. GOHDA et al. « Self-Consistent Density Functional Calculation of Field Emission Currents from Metals ». en. In : *Physical Review Letters* 85.8 (août 2000), p. 1750-1753. ISSN : 0031-9007, 1079-7114. DOI : [10.1103/PhysRevLett.85.1750](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.1750). (Visité le 15/11/2019) (cf. p. 60, 61).
- [21] Y GOHDA et al. « Density functional analysis of field emission from metals ». In : *Materials Science and Engineering : A* 327.1 (2002), p. 1-6. ISSN : 0921-5093. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(01\)01869-X](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(01)01869-X) (cf. p. 60).
- [22] P. H. CUTLER et al. « Theory of electron emission in high fields from atomically sharp emitters : Validity of the Fowler–Nordheim equation ». In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena* 11.2 (1993), p. 387-391. DOI : [10.1116/1.586866](https://doi.org/10.1116/1.586866) (cf. p. 61).
- [23] Andreas FISCHER, Marwan S. MOUSA et Richard G. FORBES. « Influence of barrier form on Fowler–Nordheim plot analysis ». en. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics : Materials, Processing, Measurement, and Phenomena* 31.3 (mai 2013), p. 032201. ISSN : 2166-2746, 2166-2754. DOI : [10.1116/1.4795822](https://doi.org/10.1116/1.4795822) (cf. p. 61).
- [24] A. KYRITSAKIS et J. P. XANTHAKIS. « Extension of the general thermal field equation for nanosized emitters ». In : *Journal of Applied Physics* 119.4 (2016), p. 045303. DOI : [10.1063/1.4940721](https://doi.org/10.1063/1.4940721) (cf. p. 61).
- [25] J. P. BARBOUR et al. « Space-Charge Effects in Field Emission ». In : *Physical Review* 92.1 (oct. 1953), p. 45-51. DOI : [10.1103/PhysRev.92.45](https://doi.org/10.1103/PhysRev.92.45) (cf. p. 62).

- [26] P Y CHEN et al. « Space Charge Effects in Field Emission Nanodevices ». In : *Nanotechnology* 20.40 (oct. 2009), p. 405202. ISSN : 0957-4484, 1361-6528. DOI : [10.1088/0957-4484/20/40/405202](https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/40/405202) (cf. p. 62).
- [27] Andreas KYRITSAKIS, Mihkel VESKE et Flyura DJURABEKOVA. « General Scaling Laws of Space Charge Effects in Field Emission ». In : *New Journal of Physics* 23.6 (juin 2021), p. 063003. ISSN : 1367-2630. DOI : [10.1088/1367-2630/abffa8](https://doi.org/10.1088/1367-2630/abffa8). arXiv : [2008.11984](https://arxiv.org/abs/2008.11984) (cf. p. 62).
- [28] R.W. HOCKNEY et J. W. EASTWOOD. *Computer Simulation Using Particles*. CRC Press, 1988. ISBN : ISBN 9780852743928 (cf. p. 64).
- [29] Y. B. ZHU et L. K. ANG. « Nonuniform Space Charge Limited Current from a Protrusive Cathode ». In : *2014 IEEE 41st International Conference on Plasma Sciences (ICOPS) Held with 2014 IEEE International Conference on High-Power Particle Beams (BEAMS)*. Washington, DC, USA : IEEE, mai 2014, p. 1-1. ISBN : 978-1-4799-2713-5 978-1-4799-2711-1 978-1-4799-2710-4. DOI : [10.1109/PLASMA.2014.7012532](https://doi.org/10.1109/PLASMA.2014.7012532) (cf. p. 64).
- [30] Y. B. ZHU et L. K. ANG. « Space Charge Limited Current Emission for a Sharp Tip ». In : *Physics of Plasmas* 22.5 (mai 2015), p. 052106. ISSN : 1070-664X, 1089-7674. DOI : [10.1063/1.4919936](https://doi.org/10.1063/1.4919936) (cf. p. 64).
- [31] B. SEZNEC et al. « Effect of Space Charge on Vacuum Pre-Breakdown Voltage and Electron Emission Current ». In : *Journal of Applied Physics* 129.15 (avr. 2021), p. 155102. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/5.0046135](https://doi.org/10.1063/5.0046135) (cf. p. 64).
- [32] A MAYER. « Numerical testing of the Fowler–Nordheim equation for the electronic field emission from a flat metal and proposition for an improved equation ». en. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B* : 16.28 (2010), p. 758-762. ISSN : 0734211X. DOI : [10.1116/1.3455495](https://doi.org/10.1116/1.3455495) (cf. p. 64).
- [33] Bruno LEPETIT. « Electronic field emission models beyond the Fowler-Nordheim one ». en. In : *Journal of Applied Physics* 122.21 (déc. 2017), p. 215105. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.5009064](https://doi.org/10.1063/1.5009064). URL : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5009064> (visité le 02/04/2021) (cf. p. 64).
- [34] Ph. TESTÉ et J.-P. CHABRERIE. « Some improvements concerning the modelling of the cathodic zone of an electric arc (ion incidence on electron emission and the cooling effect) ». en. In : *Journal of Physics D : Applied Physics* 29.3 (mars 1996). Publisher : IOP Publishing, p. 697-705. ISSN : 0022-3727. DOI : [10.1088/0022-3727/29/3/031](https://doi.org/10.1088/0022-3727/29/3/031). URL : <https://doi.org/10.1088/0022-3727/29/3/031> (visité le 07/10/2021) (cf. p. 64).
- [35] G. N. FURSEY. « Deviations from the Fowler–Nordheim theory and peculiarities of field electron emission from small-scale objects ». en. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 16.2 (mars 1998), p. 910. ISSN : 0734211X. DOI : [10.1116/1.589929](https://doi.org/10.1116/1.589929). URL : <http://scitation.aip.org/content/avs/journal/jvstb/16/2/10.1116/1.589929> (visité le 14/11/2019) (cf. p. 64).
- [36] B. NUMEROV. « A method of extrapolation of perturbation ». In : *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 84 (1924), p. 592-601. (Cf. p. 64).
- [37] S. C. MILLER et R. H. GOOD. « A WKB-Type Approximation to the Schrödinger Equation ». In : *Physical Review* 91.1 (juill. 1953), p. 174-179. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.91.174](https://doi.org/10.1103/PhysRev.91.174) (cf. p. 64).
- [38] E. L. MURPHY et R. H. GOOD. « Thermionic Emission, Field Emission, and the Transition Region ». In : *Physical Review* 102.6 (juin 1956), p. 1464-1473. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.102.1464](https://doi.org/10.1103/PhysRev.102.1464) (cf. p. 64).
- [39] Maykel MÁRQUEZ-MIJARES, Bruno LEPETIT et Didier LEMOINE. « Carbon Adsorption on Tungsten and Electronic Field Emission ». In : *Surface Science* 645 (mars 2016), p. 56-62. ISSN : 0039-6028. DOI : [10.1016/j.susc.2015.10.059](https://doi.org/10.1016/j.susc.2015.10.059) (cf. p. 66).

- [40] T.C. DROUBAY et al. « Work function reduction by BaO : Growth of crystalline barium oxide on Ag(001) and Ag(111) surfaces », en. In : *Surface Science* 632 (fév. 2015), p. 201-206. ISSN : 00396028. DOI : [10.1016/j.susc.2014.07.010](https://doi.org/10.1016/j.susc.2014.07.010). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0039602814002027> (visité le 21/11/2021) (cf. p. 66).
- [41] Herbert B. MICHAELSON. « The work function of the elements and its periodicity ». In : *Journal of Applied Physics* 48.11 (1977), p. 4729-4733. DOI : [10.1063/1.323539](https://doi.org/10.1063/1.323539) (cf. p. 66).
- [42] Chris H. MOORE et al. « Progress in Micron-Scale Field Emission Models Based on Nanoscale Surface Characterization for Use in PIC-DSMC Vacuum Arc Simulations ». In : *2020 29th International Symposium on Discharges and Electrical Insulation in Vacuum (ISDEIV)*. Sept. 2021, p. 272-273. DOI : [10.1109/ISDEIV46977.2021.9586990](https://doi.org/10.1109/ISDEIV46977.2021.9586990) (cf. p. 66).

## Chapitre 3

# Émetteur unique : Autoéchauffement, emballement résistif et bistabilité d'inversion Nottingham

*« A great deal of my work is just playing with equations and seeing what they give. »*

Paul A. M. Dirac

### Sommaire

<b>3.1 Autoéchauffement et émission de champ thermoassistée</b>	<b>73</b>
3.1.1 Évolution vers l'équilibre	73
3.1.2 Destruction thermique	78
3.1.3 Transition vers l'émission thermoassistée en régime permanent	79
3.1.4 Caractéristiques de l'émission au champ de préclaquage	82
<b>3.2 Emballement résistif et bistabilité d'inversion Nottingham</b>	<b>85</b>
3.2.1 Transition discontinue entre deux états stationnaires	85
3.2.2 Emballement transitoire au cours de l'autoéchauffement	88
3.2.3 Influence des paramètres de l'émetteur	94
3.2.4 Discussion sur les conditions de la bistabilité	98
<b>3.3 Conclusion</b>	<b>101</b>

Les premiers résultats de cette thèse se concentrent sur l'émission d'une pointe unique. Cela permet de limiter les simulations à des géométries 2D axisymétriques. Les conditions aux limites 3D présentées dans le chapitre précédent sont adaptées en conséquence suivant les schémas de la figure 3.1. Le maillage est aussi raffiné davantage comme illustré sur la figure 3.2. Avec ce maillage, le temps de calcul d'une simulation complète en 2D est de l'ordre de la minute. Il devient ainsi possible de réaliser des analyses paramétriques poussées dans des temps raisonnables.

L'intérêt de modéliser l'autoéchauffement est multiple. D'une part, cela permet de prendre en compte la contribution de la température au courant en régime d'émission de champ thermoassistée. D'autre part cela permet de déterminer le champ critique au-delà duquel l'émetteur risque d'être détruit à cause d'une température trop élevée. Ce dernier point est particulièrement intéressant pour les modèles d'émission de champ en ce sens qu'il leur permet de s'imposer de manière autosuffisante un champ limite à ne pas dépasser. Cela permet ensuite de prédire le courant limite menant à la destruction des émetteurs là où à l'inverse, les modèles purement électrostatiques sont contraints d'aller chercher cette limite par une mesure expérimentale du courant avant claquage (mesure qui ne sera pas nécessairement cohérente avec les nombreuses simplifications du modèle).



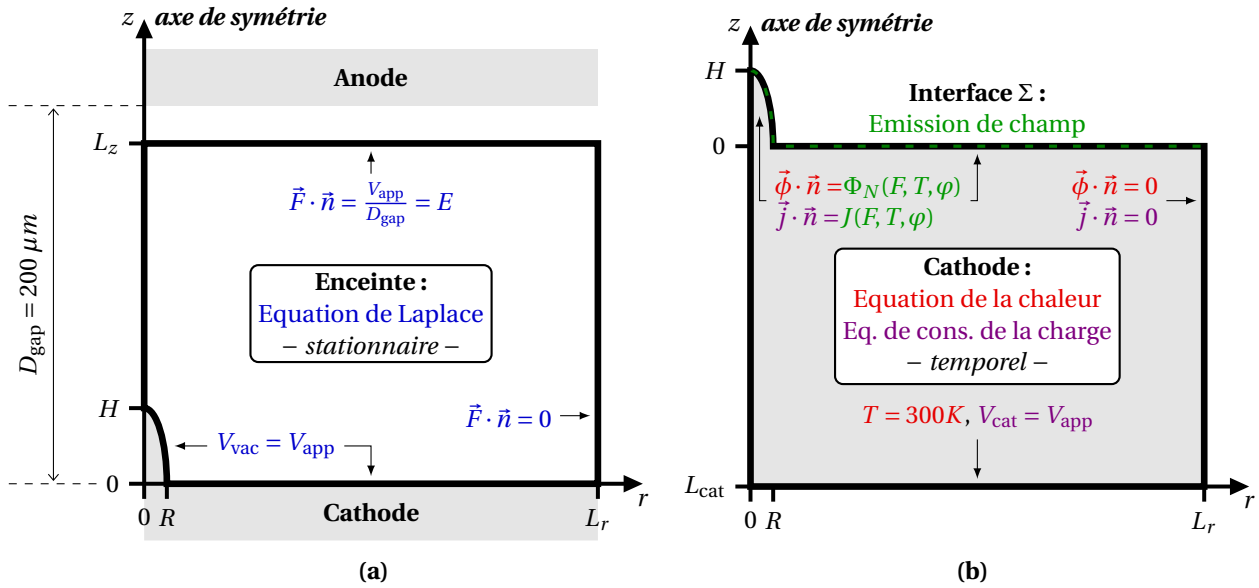


FIGURE 3.1 – Schéma des conditions aux limites pour la modélisation d'un émetteur unique axisymétrique. **(a)** : Résolution de l'équation de Laplace dans l'enceinte sous vide. **(b)** : Résolution des équations couplées de la chaleur et de la conservation de la charge dans la cathode. L'émission électronique et l'effet Nottingham sont utilisés comme conditions aux limites à l'interface métal-vide avec les valeurs du champ local  $F$  déterminés par l'équation de Laplace. Les schémas ne sont pas à l'échelle.

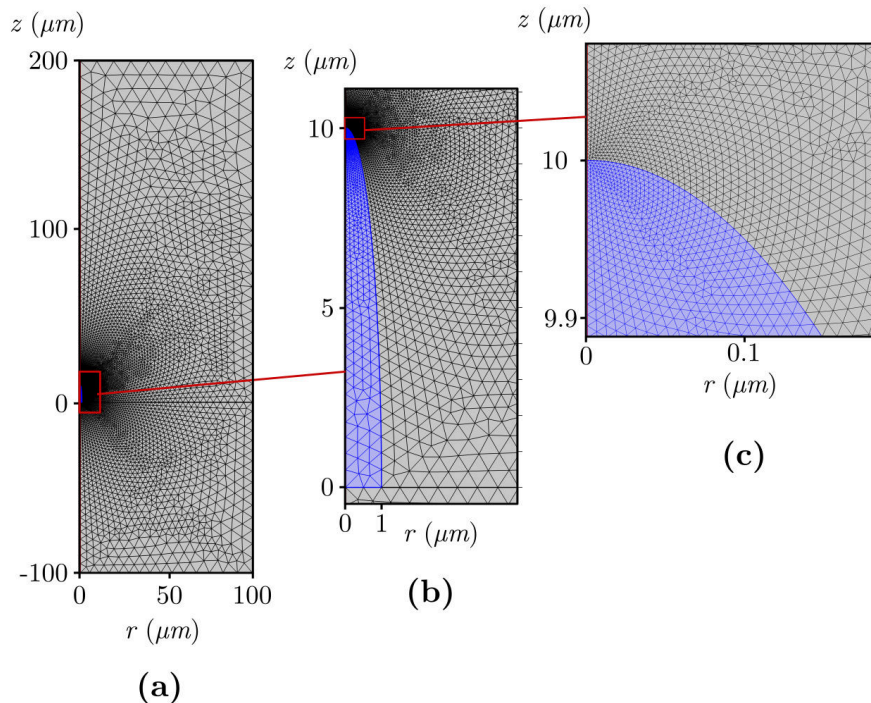


FIGURE 3.2 – Visualisation du maillage de base retenu pour nos simulations 2D axisymétriques avec des hémioellipses. **(a)** : vision d'ensemble du domaine de simulation. **(b)** : zoom sur la pointe (en bleue). **(c)** : zoom sur le sommet de la pointe. Paramètres de mailles sous COMSOL :  $h_{max} = H$ ,  $h_{min} = 10^{-4}H$ ,  $h_{grad} = 1.05$  et  $h_{curve} = 0.02$ .

Par le biais d'une analyse temporelle détaillée et l'exploration exhaustive du régime d'émission thermochamp, ce chapitre apporte un éclairage inédit sur l'autoéchauffement. Les résultats présentés visant une portée plus fondamentale qu'appliquée, ils se concentrent sur des émetteurs de la forme d'une hémicirculaire, avec un facteur d'aspect  $f$  allant de 1 à 16 (un renforcement de champ au sommet  $\beta$  allant de 3 à 103).

La première section donne une vision d'ensemble de l'autoéchauffement pour des pointes en titane. Elle détaille l'évolution vers un régime permanent, l'influence de la taille des émetteurs sur les phénomènes thermique, et la transition avec la tension d'un régime de pure émission de champ vers un régime d'émission de champ thermoassistée, jusqu'au champ de préclaquage (limite avant destruction de l'émetteur).

En se penchant ensuite sur l'autoéchauffement des métaux réfractaires présentant une température de fusion plus élevée, la seconde section révèle une transition discontinue entre deux régimes d'équilibre thermique distincts. Les mécanismes physiques sous-jacents et les modalités de cette bistabilité y sont présentés. La mise en évidence de cette bistabilité, jamais documentée jusqu'ici, a été l'objet d'une publication à l'été 2021 [1].

### 3.1 Autoéchauffement et émission de champ thermoassistée

Lorsque le champ électrique est suffisamment fort, les effets Joule et Nottingham accompagnant l'émission par effet de champ peuvent provoquer un élèvement significatif de la température de l'émetteur. Comme une agitation thermique plus élevée conduit à un apport d'électrons plus énergétique à l'interface métal/vide, une boucle de rétroaction positive se met en place : l'augmentation de la température mène à une augmentation de l'émission qui mène à une augmentation du chauffage résistif (la rétroaction sur l'effet Nottingham est plus délicate, comme on le verra par la suite).

Un grand nombre de questions émerge alors : Quelle est la contribution relative de l'effet Joule ou de l'effet Nottingham dans le chauffage ? Comment l'émetteur évolue-t-il vers une situation d'équilibre ? Ou au contraire est-il possible que cette boucle de rétroaction positive mène à la destruction thermique de l'émetteur ? Est-il alors possible de déterminer un champ électrique ou une densité de courant critique permettant de discerner entre les deux issues ? Et enfin, comment ces évolutions sont-elles influencées par les paramètres géométriques et les propriétés matériaux de l'émetteur ? Autant de questions auxquelles on s'efforcera de répondre dans cette section.

#### 3.1.1 Évolution vers l'équilibre

Commençons par étudier l'évolution de la température de pointes en titane émettant une forte densité de courant. Le titane est un matériau régulièrement utilisé pour la fabrication d'électrodes dans les machines ultra haute tension comme les accélérateurs de particules [2, 3]. L'aluminium, le cuivre et les métaux réfractaires (molybdène, tungstène et tantale) peuvent aussi être utilisés. Nous avons toutefois préféré le titane au cuivre et à l'aluminium, car son point de fusion plus élevé permet d'explorer des températures plus hautes. Par ailleurs, le cas des métaux réfractaires sera étudié dans la seconde section. Les propriétés matériaux pertinentes du titane – masse volumique, chaleur spécifique, conductivité électrique et thermique – sont prises dépendantes de la température et sont données en annexe H. Le travail de sortie est lui fixé à 4.3 eV (valeur moyenne admise).

#### Temps de montée en tension

Pour étudier l'évolution d'un autoéchauffement menant à de hautes températures depuis une situation à température ambiante, il faut porter attention à la cohérence des conditions initiales. En effet, une condition initiale supposant une température ambiante en parallèle d'une très forte densité de courant n'est pas cohérente puisqu'elle ne prend pas en compte le chauffage qui a pu avoir lieu au court de la mise en place de cette densité de courant. L'évolution risque alors d'être biaisée. Pour éviter cela, nous avons décidé pour nos études temporelles de partir d'un champ nul à température

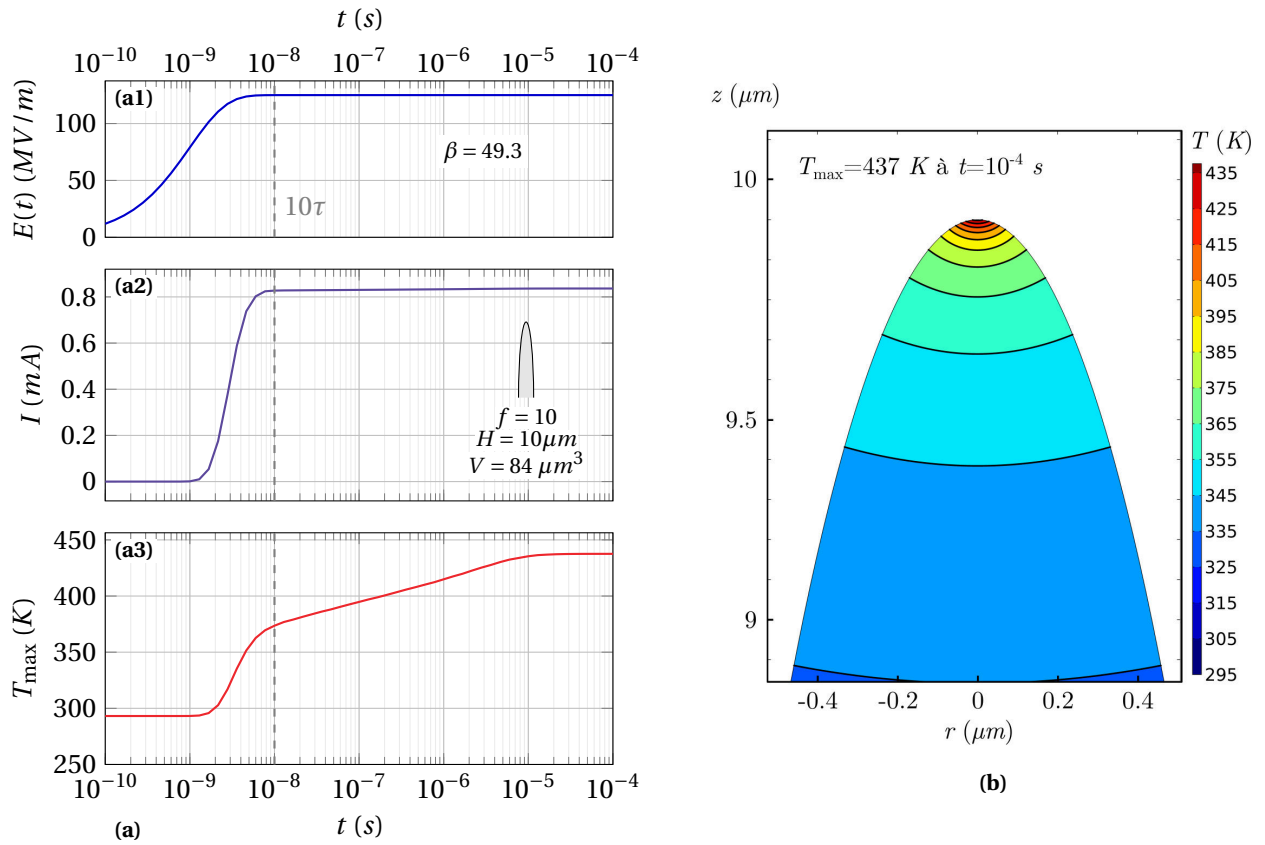


FIGURE 3.3 – Exemple de simulation 2D axisymétrique temporelle pour une pointe hémisphérique en titane ( $\varphi = 4.3 \text{ eV}$ ) de hauteur  $H = 10 \mu\text{m}$  et de facteur d'aspect  $f = 10$ . **(a)** : évolution vers un équilibre en régime permanent. **(a1)** : montée du champ global  $E(t)$ . **(a2)** : évolution du courant  $I$ . **(a3)** : évolution de la température maximale  $T_{\text{max}}$ . **(b)** : Distribution en température autour du sommet en régime permanent.

ambiante, et d'imposer ensuite une montée en tension suivant une loi exponentielle :

$$E(t) = E(1 - e^{-t/\tau}) \quad (3.1)$$

Le temps de montée  $\tau$  est ensuite fixé de sorte à être bien inférieur au temps caractéristique de diffusion thermique, afin de ne pas interférer avec la diffusion<sup>1</sup>. Dans ce cas précis, l'équation de Laplace est donc résolue à chaque pas de temps, en parallèle des équations de la chaleur et du courant.

### Résultats d'une simulation type

Voyons alors comment évolue l'émission pour une hémisphère de hauteur  $H = 10 \mu\text{m}$  et de facteur d'aspect  $f = 10$ . En appliquant une tension arbitraire  $V_{\text{app}} = 25 \text{ kV}$ , le champ global dans l'espace interélectrodes vaut  $E = V_{\text{app}}/D_{\text{gap}} = 125 \text{ MV/m}$ . Au sommet de la pointe, le renforcement de champ vaut  $\beta = 49.3$ . Le champ local vaut donc  $F = \beta E = 6.16 \text{ GV/m}$ , amplement suffisant pour observer une émission par effet de champ. Comme précisé plus haut cependant cette amplitude de champ est atteinte après un temps défini par la constante  $\tau$ . En prenant  $\tau = 1 \text{ ns}$ , le graphique (a1) de la figure 3.3 montre la montée du champ appliqué  $E(t)$ . On voit alors sur le graphique (a2) l'allumage brusque du courant  $I$  à  $1 \text{ ns}$ . Le courant se stabilise ensuite à  $10 \text{ ns}$  une fois le champ constant atteint, puis évolue très légèrement jusqu'à  $10 \mu\text{s}$ . Cette seconde évolution du courant est en fait due à

1. Dans le cadre d'une comparaison avec l'expérience, cela correspond à supposer que l'on dispose d'une alimentation capable d'effectuer une montée en tension sur un temps aussi court. Si ce n'est pas le cas, la valeur de  $\tau$  doit être adaptée en conséquence. Il faut alors avoir conscience que ce temps de montée en tension pourra avoir une influence sur l'évolution thermique des émetteurs.

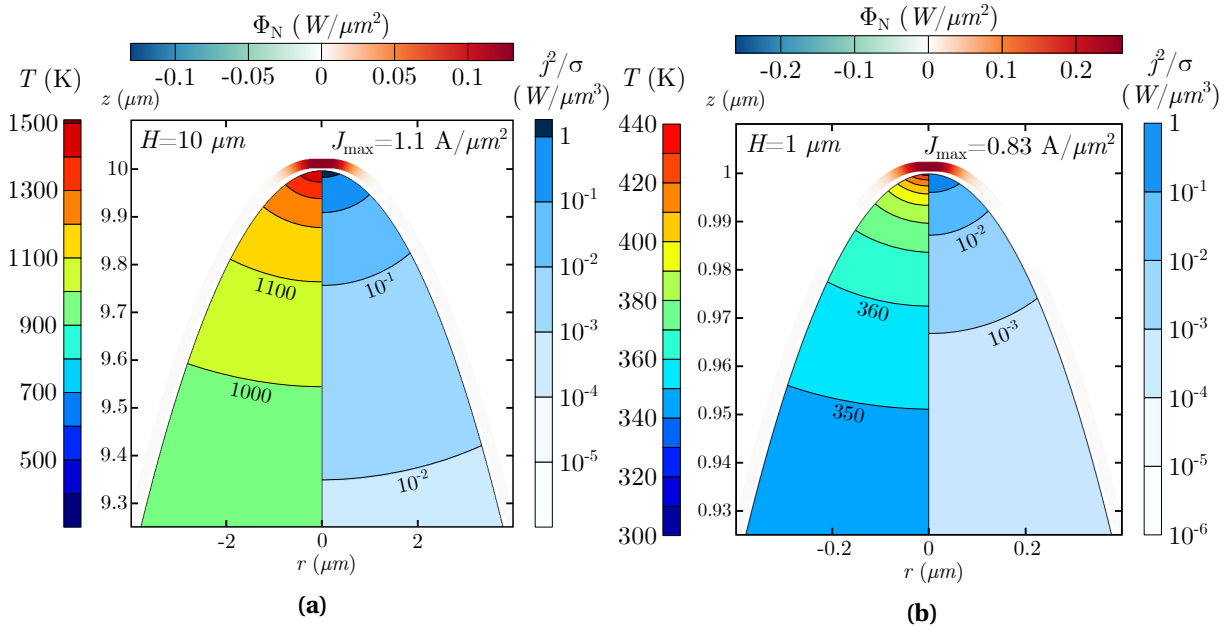


FIGURE 3.4 – Distribution à l'équilibre de la température, de l'effet Joule et de l'effet Nottingham au sommet de la pointe, pour une hémiiellipse de facteur d'aspect  $f = 10$  et (a) : de hauteur  $H = 10 \mu\text{m}$ , (b) : de hauteur  $H = 1 \mu\text{m}$ . Le tracé de l'effet Nottingham est légèrement décalé vers le haut pour une meilleure lisibilité.

l'autoéchauffement de l'émetteur que l'on peut suivre par le biais de la température maximale  $T_{\text{max}}$  sur le graphique (a3). La stabilisation de la température à  $T_{\text{max}} = 437 \text{ K}$  après  $10 \mu\text{s}$  est la signature qu'un régime permanent a été atteint. Le graphique (b) montre alors la distribution en température correspondante au sommet de la pointe.

Si ce premier exemple illustre bien la mise en place de l'autoéchauffement et l'évolution vers un équilibre, la température atteinte reste relativement faible. Le gain en courant lié à l'élévation de température était d'ailleurs à peine visible sur le graphique (a2), et vaut seulement +1.8% à l'équilibre.

### Détail de l'autoéchauffement et influence de la taille des pointes

Pour étudier les effets d'un autoéchauffement plus fort, il faut augmenter la tension. Il n'existe cependant pas de relation évidente entre le champ appliqué et la température atteinte. C'est la raison pour laquelle nous procédons par dichotomie pour déterminer rapidement et à quelques pourcents près le champ global  $E$  menant à une température maximale  $T_{\text{max}}$  donnée en régime permanent.

Pour une hémiiellipse de hauteur  $H = 10 \mu\text{m}$  et de facteur d'aspect  $f = 10$ , on trouve qu'une valeur de champ global  $E = 152 \text{ MV}/\text{m}$  mène à une température finale de  $1500 \text{ K} \pm 1\%$ . Au sommet de l'émetteur, cela donne un champ local  $F = \beta E = 7.49 \text{ GV}/\text{m}$ .

Cependant, avec les mêmes valeurs de champ pour un émetteur dix fois plus petit ( $f = 10$ ,  $H = 1 \mu\text{m}$ ) la température maximale n'atteint que  $434 \text{ K}$  : Bien que l'équation de Laplace soit invariante d'échelle, ce n'est pas du tout le cas pour l'équation de la chaleur, d'où un équilibre thermique totalement différent aux deux échelles.

La comparaison entre ces deux cas est particulièrement instructive pour comprendre les subtilités de l'autoéchauffement. La figure 3.4 montre la distribution au sommet des deux émetteurs ( $H = 10$  et  $H = 1 \mu\text{m}$ ) de la température et des grandeurs de chauffage : la densité de puissance Joule  $j^2/\sigma$  et le flux de chaleur Nottingham  $\Phi_N$ . Il faut alors noter que la distribution de champ électrique – identique dans les deux cas – mène à une densité de courant émise très proche, avec  $J_{\text{max}} = 1.1 \text{ A}/\mu\text{m}^2$  pour  $H = 10 \mu\text{m}$  et  $J_{\text{max}} = 0.83 \text{ A}/\mu\text{m}^2$  pour  $H = 1 \mu\text{m}$ , le faible écart provenant de la différence en température. De ce fait, comme on peut le voir sur les échelles de couleurs de la figure 3.4, les amplitudes de  $j^2/\sigma$  et  $\Phi_N$  sont proches entre les deux cas. Les légères différences qui persistent ne

grandeur unités	$E$ $MV/m$	$T_{\max}$ $K$	$j_{\max}^2/\sigma$ $W/\mu m^3$	$\Phi_N^{\max}$ $W/\mu m^2$	$V$ $\mu m^3$	$\dot{Q}$ $\mu W$	$\dot{Q}/V$ $\mu W/\mu m^3$	$\tau_{\text{diff}}$ $s$	$Q/V$ $pJ/\mu m^3$
$H = 10 \mu m$	152	1500	1.8	0.13	84	2167	25.8	$\sim 10^{-5}$	114
$H = 1 \mu m$	152	434	0.5	0.24	0.084	18.3	218	$\sim 10^{-7}$	11.1
$H = 1 \mu m$	190	1500	56	1.5	0.084	203	2417	$\sim 10^{-7}$	102

TABLE 3.2 – Les valeurs des grandeurs locales  $j^2/\sigma$  et  $\Phi_N$  sont données à l'équilibre, tandis que les valeurs des grandeurs intégrées  $\dot{Q}$  et  $\dot{Q}/V$  sont données à  $t = 10\tau$ .  $Q/V$  est la chaleur totale accumulée une fois l'équilibre atteint.

permettent pas d'expliquer l'écart de plus de 1000  $K$  en température.

Par ailleurs, pour comparer correctement l'autoéchauffement dans les deux situations, il faut s'intéresser aux grandeurs globales de chauffage  $\mathcal{P}_J$  et  $\mathcal{P}_N$  par rapport au volume de l'émetteur. Ces dernières sont définies par l'intégrale des grandeurs locales  $j^2/\sigma$  et  $\Phi_N$  à l'échelle de l'émetteur entier :

$$\mathcal{P}_J = \iiint_V \frac{j^2}{\sigma} dV \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_N = \iint_S \Phi_N dS \quad (3.2)$$

À cela il faut ajouter l'évacuation de la chaleur de l'émetteur vers la cathode (le thermostat  $\vartheta$ ). On note cette grandeur  $\mathcal{P}_\vartheta$ . Elle correspond à l'intégrale du flux de chaleur  $\phi$  à travers la base de l'émetteur :

$$\mathcal{P}_\vartheta = - \iint_{\text{base}} \phi dS \quad (3.3)$$

La figure 3.5 montre justement l'évolution de ces grandeurs dans le cas  $H = 10 \mu m$  (Fig. 3.5a) et  $H = 1 \mu m$  (Fig. 3.5b). Les premiers graphiques (a1) et (b1) montrent la montée exponentielle du champ électrique selon l'expression 3.1. La constante de temps  $\tau$  est prise égale à 1  $ns$ . Au bout de  $10\tau$ , on suppose la valeur asymptotique atteinte,  $E = 152 MV/m$ .

Les graphiques (a2) et (b2) montrent alors l'évolution des grandeurs globales de l'auto échauffement. Commençons par comparer les valeurs atteintes une fois la montée en tension achevée, à  $t = 10\tau$ . Dans le premier cas ( $H = 10 \mu m$ ) on observe un effet Nottingham  $\mathcal{P}_N = 1.6 mW$  environ trois fois plus important que l'effet Joule :  $\mathcal{P}_J = 0.54 mW$ . Dans le second cas ( $H = 1 \mu m$ ), la diminution d'un facteur 10 de l'échelle réduit la surface d'un facteur 100 et le volume d'un facteur 1000. Ces réductions se répercutent sur les grandeurs intégrées et on se retrouve avec un effet Joule devenu négligeable :  $\mathcal{P}_J = 0.32 \mu W$  contre  $\mathcal{P}_N = 18 \mu W$ . Toujours à  $10\tau$ , le graphique (a3) indique alors un chauffage net  $\dot{Q} = \mathcal{P}_J + \mathcal{P}_N + \mathcal{P}_\vartheta$  qui vaut donc 2.1  $mW$  pour  $H = 10 \mu m$ , environ cent fois supérieur aux 18  $\mu W$  du graphique (b3). Cependant, une fois rapportée au volume de l'émetteur, la situation s'inverse : le chauffage net par unité de volume  $\dot{Q}/V$  est à peu près dix fois plus important pour  $H = 1 \mu m$ . On s'attendrait alors à une augmentation de la température plus importante pour  $H = 1 \mu m$ . Pourtant, la chaleur accumulée par unité de volume  $Q/V$  une fois l'équilibre atteint est bien dix fois supérieure dans le premier cas : 114  $pJ/\mu m^3$  pour  $H = 10 \mu m$  contre 11.1  $pJ/\mu m^3$  pour  $H = 1 \mu m$ .

Ce constat justifie l'écart trouvé en température, visible entre les graphiques (a4) et (b4). Il est en fait lié au temps de chauffage : si le cas  $H = 1 \mu m$  présente à l'équilibre une chaleur accumulée par unité de volume moindre d'un facteur 10 malgré un chauffage volumique dix fois supérieur, c'est parce que ce chauffage s'étend sur un temps cent fois plus court. On voit en effet sur la figure 3.5 que l'équilibre est atteint vers  $t \sim 10^{-7} s$  pour  $H = 1 \mu m$  tandis qu'il faut attendre  $t \sim 10^{-5} s$  pour  $H = 10 \mu m$ .

Notons par ailleurs que ce résultat est cohérent avec l'ordre de grandeur habituel du temps de diffusion thermique  $\tau_{\text{diff}}$ . Celui-ci est proportionnel au carré d'une taille caractéristique  $L$  du système selon  $\tau_{\text{diff}} \sim L^2/\kappa$ , où  $\kappa$  est la diffusivité thermique. Une réduction de l'échelle du système d'un

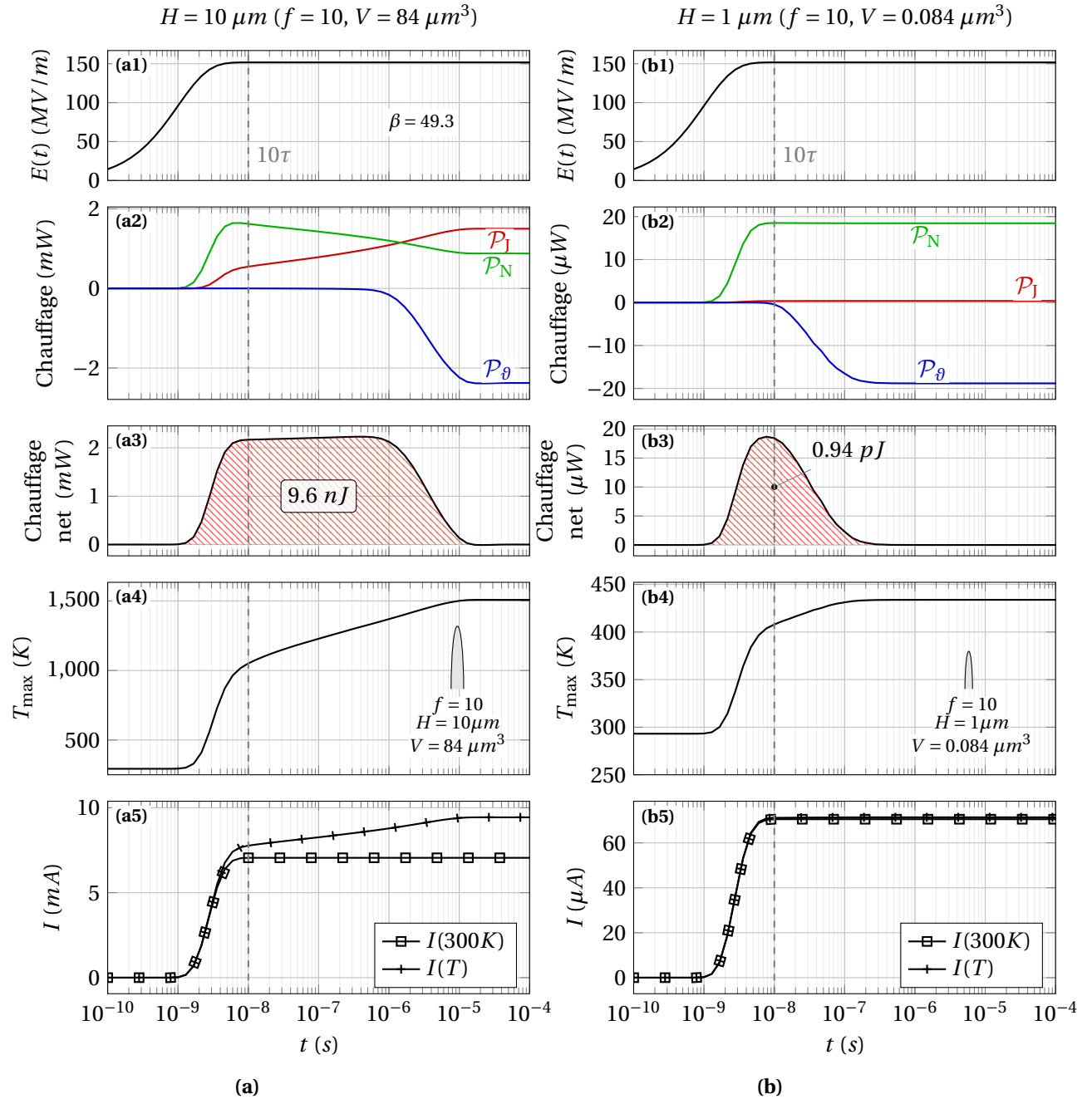


FIGURE 3.5 – Évolution de l'autoéchauffement d'un émetteur hémieipsoïdal en titane à  $E = 152 \text{ MV/m}$  (a) : pour une hauteur de  $H = 10 \mu\text{m}$  et (b) : pour une hauteur de  $H = 1 \mu\text{m}$ . (1) : Champ électrique appliqué. (2) : Grandeurs globales de chauffage (Eq. 3.2 et 3.3). (3) : Chauffage net (somme des trois termes de chauffage). (4) : Température maximale atteinte dans l'émetteur. (5) : Courant total émis comparé à une situation supposant l'absence de chauffage.

facteur 10 donne donc une diffusion cent fois plus rapide. Par ailleurs, en prenant  $L$  de l'ordre de  $H$  et la diffusivité thermique du titane à température ambiante égale à  $9.4 \times 10^{-6}$  (wikipédia), on trouve un temps caractéristique de diffusion comparable au temps d'évolution vers l'équilibre :  $\tau_{\text{diff}} \sim 10^{-5}$  s pour  $H = 10 \mu\text{m}$  et  $\tau_{\text{diff}} \sim 10^{-7}$  s pour  $H = 1 \mu\text{m}$ .

Ainsi, pour atteindre une température maximale de l'ordre de  $1500$  K avec un émetteur de hauteur  $H = 1 \mu\text{m}$ , il faut augmenter le champ électrique. Une dichotomie permet de déterminer qu'il faut un champ 25% plus élevé,  $E = 190$  MV/m. Il est intéressant de noter que l'on obtient alors un chauffage cent fois plus important :  $\dot{Q} = 0.20$  mW/ $\mu\text{m}^3$ , qui permet de compenser la diffusion cent fois plus rapide d'obtenir une chaleur accumulée par unité de volume  $Q/V = 102$  pJ/ $\mu\text{m}^3$ . Les valeurs numériques utilisées dans les derniers paragraphes sont résumées dans le tableau 3.2.

Enfin, terminons cette étude en nous intéressant à l'évolution vers l'équilibre dans le cas de l'émetteur de hauteur  $H = 10 \mu\text{m}$ . Au cours de la montée en tension, on voit sur le graphique (a2) que c'est l'effet Nottingham qui apparait comme première source de chaleur, suivi par l'effet Joule. Une fois la montée en tension achevée en revanche, l'effet Joule est suffisamment important pour enclencher une rétroaction positive : plus la température augmente, plus le courant émis est important et plus le chauffage résistif augmente (à quoi s'ajoute la diminution de la conductivité électrique avec la température). L'effet Nottingham, lui, subit alors une rétroaction négative : bien que son amplitude soit proportionnelle à la densité de courant,  $\Phi_N = |J/e| \times \mathcal{E}_N$ , la valeur du bilan énergétique par électron (l'énergie Nottingham  $\mathcal{E}_N$ ) diminue lorsque la température augmente.

Au total, la somme de  $\mathcal{P}_J$  et  $\mathcal{P}_N$  donne tout de même un chauffage net positif, et légèrement croissant comme le laisse voir le graphique (a3). Cependant, ce début d'emballlement thermique est finalement contrebalancé par l'évacuation de la chaleur vers le thermostat.

### 3.1.2 Destruction thermique

L'étude précédente a montré uniquement des cas d'autoéchauffements stables, au cours desquels l'évacuation thermique était suffisante pour freiner la boucle de rétroaction positive émission-échauffement. En revanche, dans le cas d'un matériau conduisant moins bien l'électricité ou la chaleur, d'un champ électrique plus fort ou d'une géométrie moins favorable à l'évacuation thermique, il aurait été tout à fait possible que la situation dégénère vers un emballement s'achevant par la destruction thermique de l'émetteur, suivant un des scénarios décrits au chapitre 1, sous-section 1.3.

Ces scénarios induisant changements d'état et déformations de l'émetteur sortent du domaine de validité de notre modèle, qui n'inclut pas la physique décrivant ces différentes évolutions vers un claquage électrique. On peut cependant définir pour chacun de ces scénarios un point de préclaquage qu'il faut d'abord atteindre avant que les phénomènes physiques supplémentaires n'entrent en jeu. En deçà de cette condition, la simple physique de l'autoéchauffement au cours de l'émission de champ reste suffisante.

Pour la plupart des scénarios, cette condition de préclaquage peut être assimilée à l'atteinte de la température de fusion de l'émetteur. Il est ainsi raisonnable de supposer que dans la gamme de paramètres que nous allons explorer – émetteurs métalliques de hauteur et rayon compris entre 1 et  $10 \mu\text{m}$  soumis à une gamme de champ allant de 5 à  $10$  GV/m en DC – les émetteurs ne risquent pas d'être détruits tant que la température reste en deçà du point de fusion

Ainsi, nous définissons le champ de préclaquage  $E_{\text{pb}}$  d'un émetteur comme le champ appliqué nécessaire pour que la température maximale atteigne le point de fusion. Au-delà de cette limite, il apparait clair que notre modèle ne permettra plus de décrire correctement l'évolution physique de la situation. Dans la suite, nos simulations sont donc restreintes à des champs inférieurs à celui de préclaquage, au-delà duquel l'émetteur dépasse son point de fusion.

Ce champ de préclaquage peut être déterminé par dichotomie pourvu qu'on fixe la précision voulue sur la température de fusion. Dans l'optique d'un compromis entre temps de calcul et précision nous nous sommes limités à une précision sur la température de fusion à 1% près.

La figure 3.6 donne alors les champs de préclaquage  $E_{\text{pb}}$  pour des émetteurs hémioïloïdaux avec un facteur d'aspect allant de 1 à 10 et une hauteur de 1 ou  $10 \mu\text{m}$  (courbes bleues). Les valeurs à

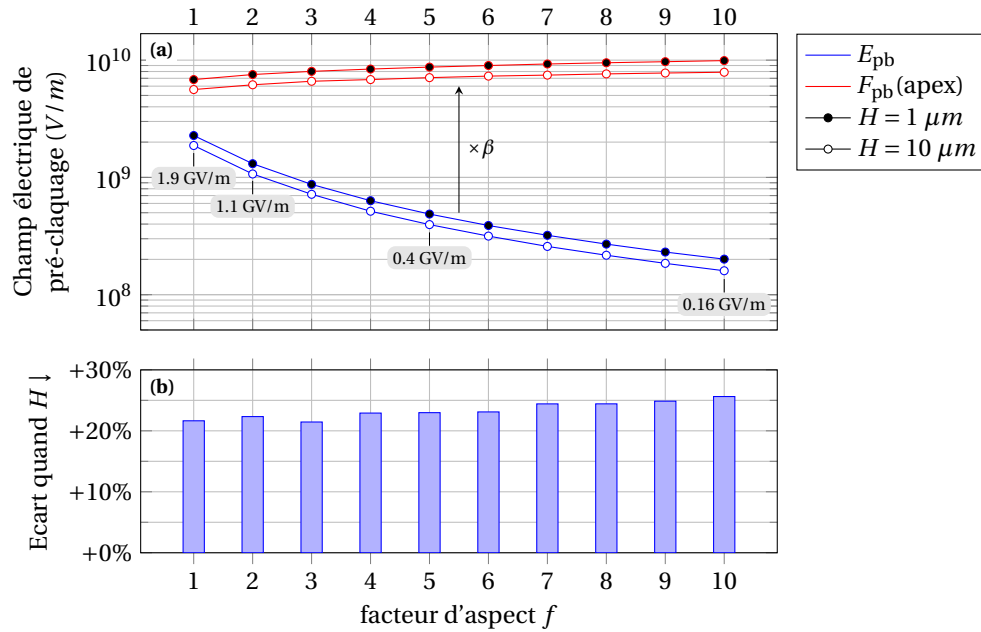


FIGURE 3.6 – (a) : Champ électrique de préclaquage  $E_{pb}$  (courbes bleues) pour des émetteurs hémilipsoïdes de facteur d'aspect  $f$  allant de 1 à 10 pour une hauteur de  $H = 10 \mu\text{m}$  et  $H = 1 \mu\text{m}$ . Le champ électrique correspondant au sommet de l'émetteur  $F_{pb} = \beta E_{pb}$  est montré en rouge. (b) : Augmentation du champ de préclaquage quand la hauteur de l'émetteur passe de  $H = 10 \mu\text{m}$  à  $H = 1 \mu\text{m}$ .

$H = 10 \mu\text{m}$  pour  $f = 1, 2, 5$ , et  $10$  sont explicitement indiqués, car elles seront réutilisées par la suite. Chaque champ de claquage correspond à l'application d'une tension  $V_{app} = E_{pb} \times D_{gap}$  – tension de préclaquage – différente pour chaque facteur d'aspect. Étant donné que le champ local  $F$  au niveau de l'émetteur dépend justement du facteur d'aspect  $f$  par le biais du renforcement de champ  $\beta$ , la figure 3.6a donne aussi la valeur du champ de préclaquage au sommet,  $F_{pb} = \beta E_{pb}$  (courbes rouges). On remarque alors que le champ local de préclaquage diminue pour les faibles  $f$  (correspondant à des pointes moins effilées). La raison est la suivante : Le ratio surface sur volume pour ces émetteurs moins effilés favorise l'effet Joule par rapport à l'effet Nottingham, ce qui facilite l'échauffement à haute température. La destruction thermique intervient alors à un champ local plus faible.

Pour ce qui est de l'effet de la taille, la figure 3.6b montre que la réduction d'échelle d'un facteur 10 augmente le champ de préclaquage d'un montant entre +20 et +25% sur la gamme de facteurs d'aspect considéré. Ce résultat est à relier notre précédente étude de cas : une fois rapportée au volume entier de l'émetteur, la réduction d'échelle d'un facteur 10 laisse inchangé l'effet Joule (qui est un chauffage en volume) et favorise l'effet Nottingham (qui est un chauffage en surface) d'un facteur 10. En parallèle cependant, le temps de diffusion thermique est réduit d'un facteur 100. Ainsi, l'éventuel gain en amplitude de chauffage ( $\sim \dot{Q}/V \times 10$ ) est entièrement compensé par une durée du chauffage plus courte ( $\sim \tau_{diff} \div 100$ ), ce qui résulte en la nécessité d'un champ électrique plus important pour atteindre une situation thermique équivalente. Rappelons d'ailleurs que l'augmentation de champ pour atteindre la même température maximale de  $1500 \text{ K}$  pour  $H = 1 \mu\text{m}$  à  $f = 10$  dans l'étude de cas précédente était justement de 25% : de  $152 \text{ MV/m}$  à  $190 \text{ MV/m}$ .

On peut donc conclure que réduire la taille des aspérités présentes à la surface de la cathode devrait améliorer sa tenue aux hautes tensions. Notons toutefois que ce résultat pourrait ne pas être entièrement transposable aux échelles nanométriques qui impliquent généralement une modification des phénomènes de conduction (thermique et électrique).

### 3.1.3 Transition vers l'émission thermoassistée en régime permanent

Maintenant que l'on a posé une limite supérieure  $E_{pb}$  sur le champ applicable, on peut définir le courant maximal  $I_{pb}$  qu'un émetteur peut fournir avant de s'autodétruire. À partir de cette valeur de



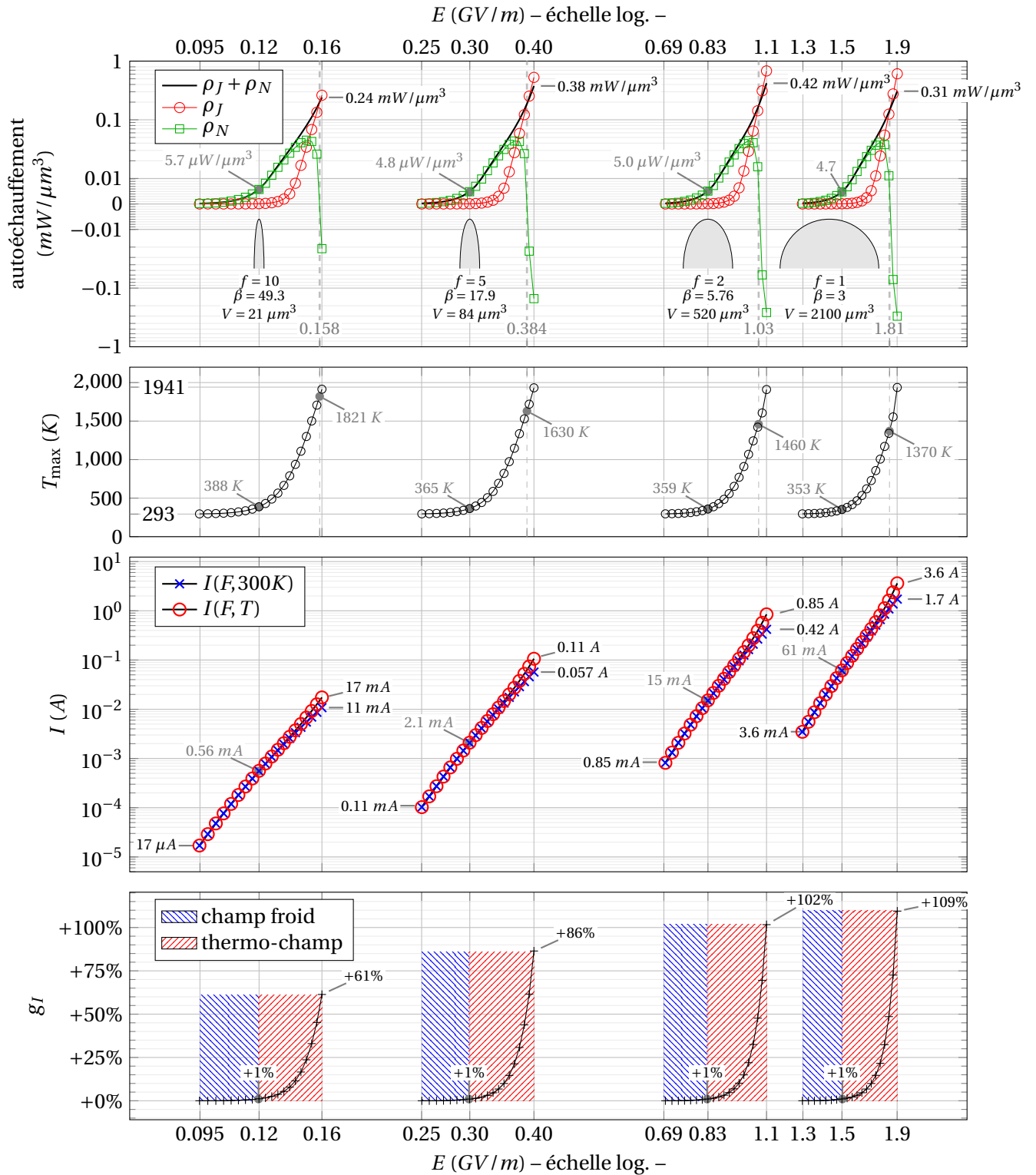


FIGURE 3.7 – Variation avec le champ appliqué  $E$  des grandeurs globales définies par les équations 3.4 à 3.7 sur la gamme  $\Delta E = [E_{\min}, E_{\text{pb}}]$  pour des facteurs d'aspect  $f = 1, 2, 5$  et  $10$ .

- 1er panneau : variation des chauffages Joule et Nottingham moyennés sur le volume. La ligne hachurée verticale indique le passage à un effet Nottingham en moyenne refroidissant. L'axe  $y$  est ici en échelle symlog : linéaire entre  $-0.01$  et  $0.01$ , puis logarithmique au-delà. Les schémas en insert montrent le facteur d'aspect  $f$  des émetteurs considérés, le renforcement de champ au sommet  $\beta$  correspondant et leur volume  $V$ .

- 2e panneau : augmentation de la température maximale  $T_{\text{max}}$  à l'intérieur de l'émetteur.

- 3e panneau : augmentation du courant émis sans contribution thermique :  $I(F, 300K)$  et avec contribution :  $I(F, T)$ .

- 4e panneau : gain en courant  $g_I$  du à la température. Ce gain correspond à l'écart relatif entre les courbes  $I(F, 300K)$  et  $I(F, T)$ . Une séparation arbitraire à  $g_I = 1\%$  est mise en évidence par les hachures bleues et rouges pour délimiter le régime de pure émission de champ de celui du régime d'émission thermo-champ.

courant, on définit le champ  $E_{\min}$  comme une limite inférieure arbitraire à laquelle l'émetteur émet un millièrme de  $I_{pb}$ . On fixe ainsi une gamme de champ  $\Delta E = [E_{\min}, E_{pb}]$  sur laquelle on va étudier la transition d'un régime de pure émission de champ vers une émission de champ thermoassistée.

Par soucis de concision, les résultats de cette étude se concentrent sur les émetteurs hémisphériques de hauteur  $H = 10 \mu m$  et de facteurs d'aspect  $f = 1, f = 2, f = 5$  et  $f = 10$  correspondant à des renforcements de champ au sommet  $\beta = 3, \beta = 5.76, \beta = 17.9,$  et  $\beta = 49.3$ . Le matériau considéré est toujours le titane. Sa température de fusion vaut  $T_F = 1941 K$  et son travail de sortie est pris égal à  $4.3 eV$ . Enfin, on se concentre dans cette étude sur les grandeurs de l'autoéchauffement en régime permanent, une fois l'équilibre atteint.

Sur la gamme de champ  $\Delta E$ , la transition est étudiée à travers les grandeurs globales suivantes :

- Les valeurs moyennes des effets Joule et Nottingham par unité de volume (chauffage total rapporté au volume de l'émetteur entier  $V$ ) :

$$\rho_J = \frac{\mathcal{P}_J}{V} = \frac{1}{V} \iiint_V \frac{j^2}{\sigma} dV \quad \text{et} \quad \rho_N = \frac{\mathcal{P}_N}{V} = \frac{1}{V} \iint_S \Phi_N dS \quad (3.4)$$

- La température maximale de l'émetteur :

$$T_{\max} = \max_V(T) \quad (3.5)$$

- Le courant total émis :

$$I(F, T) = \iint_S J(F, T) dS \quad (3.6)$$

- Et le gain relatif en courant dû à l'augmentation en température :

$$g_I = \frac{I(F, T) - I(F, 300K)}{I(F, 300K)} \quad (3.7)$$

La variation avec le champ appliqué de ces grandeurs (de l'équation 3.4 à l'équation 3.7) est montrée sur la figure 3.7

Profitant des différents rapports d'aspect considérés, les résultats pour chaque émetteur sont affichés sur le même axe  $x$ . Chaque marqueur à une valeur de champ  $E$  donné correspond à une simulation temporelle 2D axisymétrique dont les quantités sont évaluées une fois le régime permanent atteint. Notons que pour la gamme de paramètres présentée dans ce travail, le temps de convergence vers un état stationnaire est compris entre quelques microsecondes et plusieurs dizaines de microsecondes, ce qui est en accord avec l'estimation grossière  $\tau \sim H^2/\kappa$  que l'on obtient à partir de la diffusivité thermique du matériau  $\kappa = \lambda/\rho c$ .

Le premier panneau de la figure 3.7 montre la contribution respective de l'effet Nottingham et du chauffage résistif une fois l'équilibre thermique atteint pour les différents champs électriques appliqués. Étant à l'équilibre, la somme des grandeurs  $\rho_J$  et  $\rho_N$  donne ici exactement l'opposé de la chaleur dissipée à la base de l'émetteur,  $\rho_\theta = \mathcal{P}_\theta/V$ .

Remarquons ensuite que pour les valeurs faibles et modérées de chaque gamme  $\Delta E$ , l'effet Nottingham contribue seul au chauffage. Ce constat est cohérent avec les résultats de Su *et al.*<sup>2</sup> [4] (*in ref.* Fig. 9) et ceux d'Ancona<sup>3</sup> [5].

C'est seulement sur la fin de la gamme de champ (*i.e.* à densité de courant suffisamment forte) que l'effet Joule devient comparable. À mesure que l'on se rapproche du champ de précalquage, le chauffage résistif prend le relais tandis que l'effet Nottingham finit par diminuer après avoir atteint un maximum, jusqu'à devenir négatif.

2. Notons que ce travail modélise une triode à émission de champ à symétrie axiale 2D, avec une hauteur d'émetteur de l'ordre de  $1 \mu m$ .

3. Dans cette référence en revanche, le chauffage résistif est trouvé négligeable sur toute la gamme d'émission. Nous supposons que cela est relié à la taille de l'émetteur considérée, inférieur à  $0.5 \mu m$ . Le fort ratio surface sur volume qui en découle favorise alors l'effet Nottingham devant l'effet Joule.

Le deuxième panneau montre l'augmentation continue de la température maximale vers le point de fusion  $T_F = 1941\text{ K}$ , en conséquence de l'autoéchauffement. Les valeurs de champ  $E_N$  pour lesquelles  $\rho_N = 0$  sont indiquées par des tics supplémentaires sur l'axe des  $x$  du premier panneau, et les températures correspondantes  $\bar{T}_N$  sont données sur le deuxième panneau. On remarque alors que l'effet Nottingham moyen  $\rho_N$  s'inverse à des températures de plus en plus petites à mesure que le facteur d'aspect  $f$  diminue. C'est en fait la conséquence d'un champ électrique local inférieur sur la surface d'émission, comme on le verra plus en détail dans la prochaine sous-section. Précisons que  $\bar{T}_N$  correspond ici à la température d'inversion de la grandeur globale  $\rho_N$ , et est par conséquent relié, mais distinct de la définition de température locale d'inversion Nottingham  $T_N(F, \varphi)$ .

Pour évaluer l'augmentation de courant dû à la montée en température, deux ensembles de résultats sont comparés sur le troisième panneau. Le premier ensemble correspond à des simulations tenant compte uniquement de l'électrostatique (pure émission de champ). Dans ce cas, le courant  $I(F, 300\text{ K})$  est obtenu en fixant une température de  $300\text{ K}$  sur toute la surface d'émission (croix bleues, Fig. 3.7 - 3e panneau). Au contraire, les résultats du second ensemble proviennent d'une résolution complète du modèle, comme décrit dans le chapitre précédent. Le calcul du courant utilise la distribution en température à la surface d'émission (cercles rouges - Fig. 3.7 - 3e panneau). Quand le champ appliqué est bien inférieur au champ de préclaquage  $E_{pb}$ , les deux courbes sont identiques. Plus proche de  $E_{pb}$  en revanche, un écart apparaît qui témoigne d'un gain en courant dû à une contribution croissante d'électron "chaud". Ces électrons ayant une énergie normale supérieure, ils traversent la barrière de potentiel au-dessus du niveau de Fermi. On entre alors dans un régime d'émission de champ thermoassistée, ou régime thermochamp.

Le dernier panneau montre le gain en courant  $g_I(E)$  qui n'est autre que l'écart relatif entre la courbe rouge  $I(F, T)$  et la courbe bleue  $I(F, 300\text{ K})$  du troisième panneau. C'est donc une grandeur appropriée pour distinguer le régime de pure émission de champ ( $g_I \sim 0$ ) du régime thermoassisté ( $g_I > 0$ ). En posant une limite arbitraire entre les deux régimes à  $g_I = 1\%$ , une séparation apparaît pour chaque facteur d'aspect à un chauffage volumique moyen aux alentours de  $5\ \mu\text{W}/\mu\text{m}^3$ , uniquement lié à l'effet Nottingham.

Concernant l'amplitude du gain, sa valeur maximale sur la gamme  $\Delta E = [0.095, 0.16]\text{ GV/m}$  vaut  $g_I = +61\%$  pour  $f = 10$ . Pour  $f = 1$ , la valeur maximale atteint  $g_I = +109\%$  sur une gamme relativement plus petite,  $\Delta E = [1.3, 1.9]\text{ GV/m}$ . Ce résultat semble indiquer que moins les émetteurs sont profilés, plus la température contribue à l'émission.

### 3.1.4 Caractéristiques de l'émission au champ de préclaquage

Pour mieux comprendre les différences en régime thermochamp entre les différents facteurs d'aspect, regardons de plus près les distributions des variables locales  $F$ ,  $T$  et  $J(F, T)$  au champ de préclaquage  $E_{pb}$ . Les figures 3.8 et 3.9 montrent ces distributions pour  $f = 1, 2$  et  $5$ .

Les graphiques supérieurs de la figure 3.8 montrent la distribution de champ local  $F(r)$  au champ global  $E = E_{pb}$ . En accord avec le constat de la figure 3.6, on voit bien sur ce premier graphique que le champ au sommet de l'émetteur est plus faible pour les plus petits facteurs d'aspect. Cependant, le renforcement de champ y est aussi moins piqué et s'étend sur une plus grande surface. Ainsi, pour les petits facteurs d'aspect, l'émission a lieu à champ plus faible, mais sur une surface plus large que pour les grands facteurs d'aspect. On peut mesurer ce dernier effet en introduisant le rayon  $R_{90\%}$  qui définit pour un émetteur axisymétrique la surface autour du sommet qui émet 90% du courant total :

$$\int_0^{R_{90\%}} 2\pi r \mathcal{C}(r) J(F, T) dr = 0.9 \times I(F, T) \quad (3.8)$$

avec

$$I(F, T) = \int_0^R 2\pi r \mathcal{C}(r) J(F, T) dr \quad (3.9)$$

le courant total extrait et  $\mathcal{C}(r)$  le jacobien de  $\ell(r)$  pour un ellipsoïde d'indice curviligne  $\ell$ , de hauteur  $H$  et de rayon  $R$  (cf. Eq. 2.40).

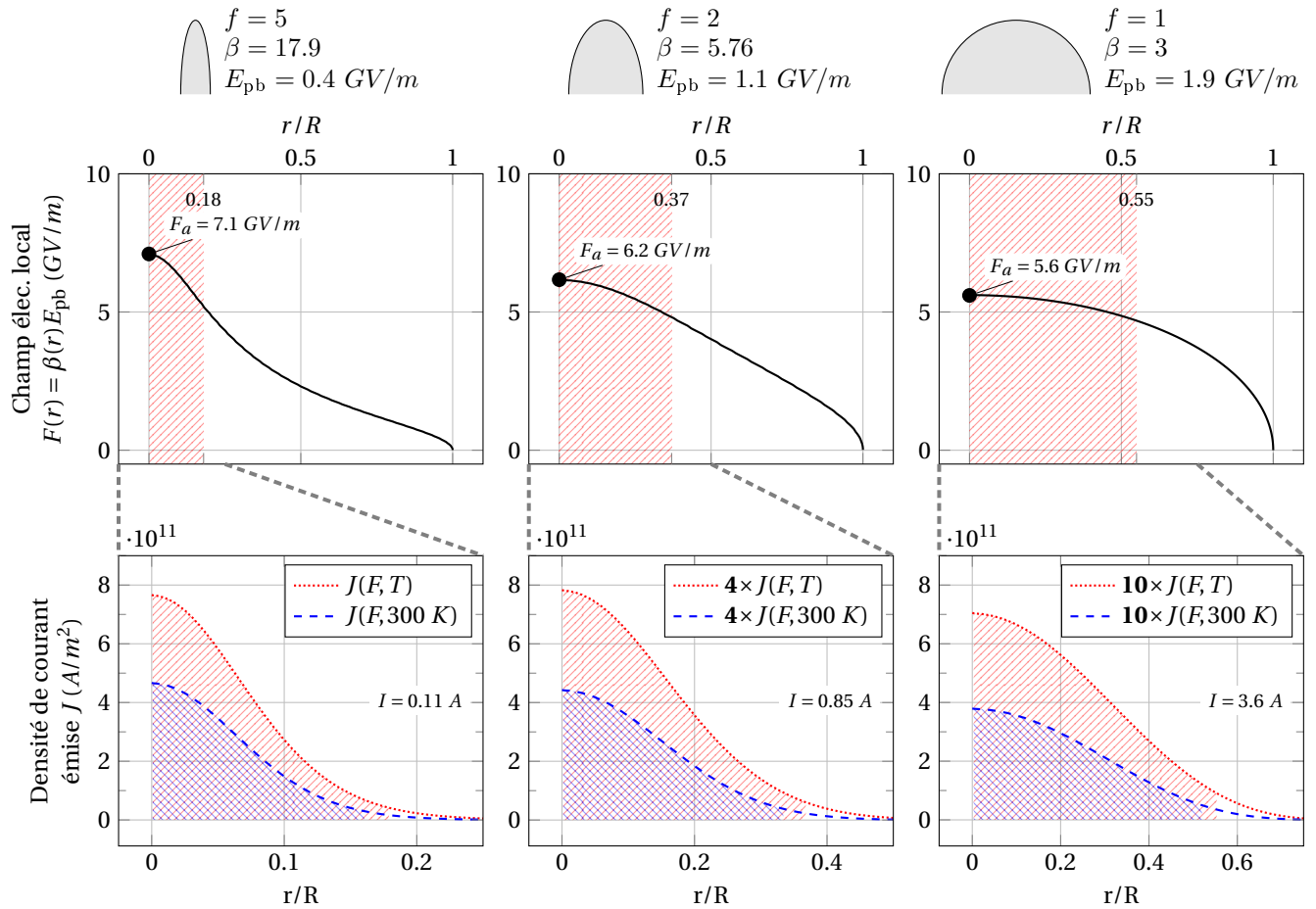


FIGURE 3.8 – Emission d'un émetteur isolé pour les facteurs d'aspect  $f = 5$ ,  $f = 2$  et  $f = 1$  sous un champ appliqué égal à leur champ de préclaquage. Les schémas rappellent les propriétés des émetteurs. La première série de graphiques compare la variation radiale de champ électrique local  $F$  sur toute la surface de l'émetteur, de  $r = 0$  à  $r = R$ , avec un axe  $y$  commun.  $F_a$  correspond au champ électrique local au sommet des émetteurs. La deuxième série de graphiques donne la distribution correspondante de densité de Courant émis, avec  $-J_e(F, T)$  – et sans  $-J_e(F, 300 K)$  – prise en compte de la contribution thermique. Pour une meilleure lisibilité, l'axe  $y$  est ici aussi commun, mais les densités de courant ont du être mise à l'échelle par un facteur 4 et 10 respectivement pour  $f = 2$  et  $f = 1$ , comme indiqué en gras dans la légende. Notons enfin que l'axe des abscisses est centré sur la surface émettant 90% du courant total. Ces surfaces (traduites en coordonnées radiales) sont mises en évidence par des hachures rouges et bleues.

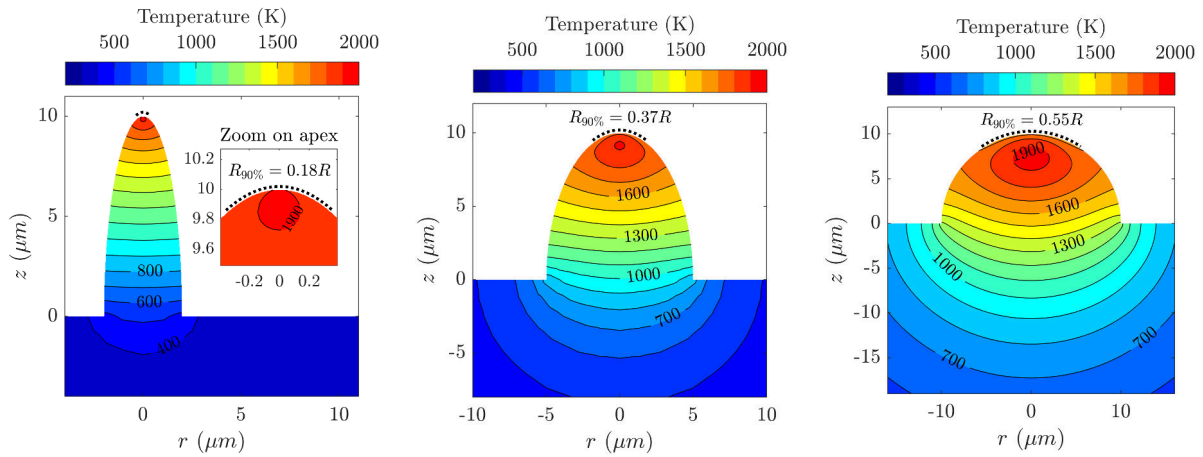


FIGURE 3.9 – Courbes isothermes au champ de préchauffage d’un émetteur isolé pour les facteurs d’aspect  $f = 5$ ,  $f = 2$  et  $f = 1$ . L’écart entre deux courbes successives est de  $100\text{ K}$ . La ligne épaisse en pointillé au-dessus des émetteurs indique la surface contribuant à 90% du courant émis.  $R_{90\%}$  est le rayon correspondant.

On obtient  $R_{90\%} = 0.18R = 0.36\ \mu\text{m}$  pour  $f = 5$ ,  $R_{90\%} = 0.37R = 1.85\ \mu\text{m}$  pour  $f = 2$  et  $R_{90\%} = 0.55R = 5.5\ \mu\text{m}$  pour  $f = 1$ . Ces valeurs sont illustrées sur la figure 3.8 par des hachures rouges et sur la figure 3.9 par une épaisse courbe noire en pointillé au-dessus de l’émetteur.

Le champ électrique globalement plus faible sur la surface d’émission pour les facteurs d’aspect plus petit explique pourquoi la température contribue davantage au courant pour les émetteurs moins profilés. En effet, l’influence de la température sur  $J(F, T)$  prédite par la théorie est précisément plus importante à champ plus faible.

Par ailleurs, la plus grande surface d’émission des émetteurs à plus petit facteur d’aspect explique pourquoi leur courant émis est supérieur tandis que leur densité de courant est inférieure comme le montre la seconde série de graphiques de la figure 3.8. On y voit que la densité de courant est à peu près inférieure d’un facteur 4 pour  $f = 2$  et d’un facteur 10 pour  $f = 1$ , comparée à  $f = 5$ , alors que la tendance est inversée pour le courant  $I$ .

Détaillons maintenant les distributions en température de la figure 3.9. La première observation intéressante est que la température maximale se trouve ici non plus au sommet, où l’effet Joule est maximum, mais légèrement en dessous. Ce détail témoigne d’un effet Nottingham devenu refroidissant en surface, causant l’enfoncement du maximum de température. Cet enfoncement est d’ailleurs plus marqué pour  $f = 1$  que pour  $f = 2$  et  $f = 5$ . Rappelons alors que la température d’inversion Nottingham suit en première approximation la formule  $T_N \propto F/\varphi^{1/2}$  (cf. Eq. 2.38). Le travail de sortie étant le même pour les trois émetteurs, le champ local plus faible à la surface de l’émetteur  $f = 1$  (mis en évidence sur la figure 3.8) explique que sa température d’inversion  $T_N$  est plus faible. À température égale (par définition du champ de claquage, la température maximale des trois émetteurs vaut  $1941\text{ K}$ ) l’effet Nottingham est donc plus refroidissant pour l’émetteur  $f = 1$  ce qui justifie un maximum de température plus enfoncé. Notons ici que dans le cas du titane, l’enfoncement du maximum de température ne perturbe pas l’évolution vers un régime permanent. Nous verrons dans la prochaine section que la situation est différente à température plus élevée pour les métaux réfractaires.

Toujours sur la figure 3.9, on peut aussi remarquer que la surface d’émission est plus large pour les plus petits facteurs d’aspect, et l’effet Joule chauffe une plus grande portion de volume sous le sommet de l’émetteur. La montée en température s’étend alors davantage à la base de l’émetteur pour les petits facteurs d’aspect. Ceci est particulièrement visible pour  $f = 2$  et  $f = 1$  sur la figure 3.9 :  $5\ \mu\text{m}$  sous la base de l’émetteur on atteint quasiment  $600$  degrés pour  $f = 2$  et  $1200\text{ K}$  pour  $f = 1$ . La question se pose alors de savoir si l’évacuation thermique d’un émetteur pourrait impacter de manière significative l’émission d’autres aspérités dans son voisinage, donnant lieu à ce qu’on appellera ici un couplage thermique. En particulier, cette interaction pourrait être amplifiée dans le

cas des métaux réfractaires dont la température à l'approche du champ de préclaquage est encore plus élevée.

Cependant, l'étude de ce possible couplage thermique requiert la modélisation de plusieurs émetteurs en géométrie 3D. Nous délégons donc son étude au chapitre suivant et achevons d'abord le présent chapitre par l'étude de l'autoéchauffement dans le cas des métaux réfractaires.

## 3.2 Autoéchauffement des métaux réfractaires : emballlement résistif et bistabilité d'inversion Nottingham

Pour aller plus loin dans l'étude des effets thermiques, cette dernière section explore l'autoéchauffement dans le cas des métaux réfractaires. Ces matériaux affichant un point de fusion plus élevé, on s'attend à pouvoir explorer les effets thermiques à plus haute température encore. Pour chaque émetteur, l'intégralité du régime thermochamp est explorée, jusqu'à atteindre la température de fusion. L'analyse porte ici sur la mise en évidence d'une transition discontinue entre deux types d'équilibre thermique en régime permanent. Ce comportement bistable des émetteurs apparaît relié à l'inversion Nottingham. Au-delà d'une valeur seuil de champ électrique, un emballlement transitoire de l'effet Joule est observé, lié à la rétroaction positive de la température sur le chauffage résistif. L'augmentation rapide de la température qui en découle peut être contenue par l'inversion de l'effet Nottingham (rétroaction négative de la température sur le flux de chaleur Nottingham devenu refroidissant). Nous proposons d'appeler ce phénomène, non documenté jusqu'ici dans la littérature, la bistabilité d'inversion Nottingham. Cette bistabilité (transition discontinue entre deux états stationnaires) repose ainsi sur deux boucles de rétroaction contraires. Par ailleurs, son apparition dépend de la géométrie et des propriétés matériaux de l'émetteur. Ainsi, en parallèle de la contribution au domaine des sources d'électrons et du claquage sous vide, cette étude met en lumière une évolution non linéaire d'un système d'équations bien connues et couplées de manière autocohérente, ce qui présente un intérêt pour le domaine fondamental de la dynamique des systèmes complexes.

Dans un souci de clarté, nous considérons dans cette étude un émetteur unique hémioïloïdal. Notons toutefois qu'une géométrie d'émetteur différente peut fortement modifier le déroulement de l'autoéchauffement, comme on le verra au chapitre 6 pour le cas spécifique de nanostructures de carbone exhibant une géométrie type sphère-sur-cône.

### 3.2.1 Transition discontinue entre deux états stationnaires

Commençons par le cas d'un émetteur hémioïloïdal en tungstène, avec un travail de sortie pris égal à  $\phi = 4.5 \text{ eV}$ , de hauteur  $H = 10 \text{ }\mu\text{m}$  et de rayon  $R = 1 \text{ }\mu\text{m}$ , ce qui donne un facteur d'aspect  $f = H/R = 10$  et un renforcement au sommet  $\beta = 49.3$  (Fig. 3.10a). Les propriétés matériaux utilisées pour le tungstène sont données en annexe H.

La figure 3.10b montre l'augmentation de la température au sommet de l'émetteur  $T_a$  et de la température maximale  $T_{\text{max}}$ , en régime permanent, en fonction du champ appliqué  $E$ . Étant intéressé dans le processus d'autoéchauffement, on explore toute la gamme de champ menant de la température ambiante ( $\sim 300 \text{ K}$ ) au point de fusion du tungstène  $T_F = 3695 \text{ K}$ . Les maxima de densités de courant correspondant,  $J_{\text{max}}(E, T)$ , sont tracés sur la figure 3.10c. Chaque point sur ces graphiques provient donc d'une simulation 2D axisymétrique complète ayant abouti à un équilibre en régime permanent.

De manière étonnante cependant, les courbes montrent un saut soudain pour les deux températures, que l'on note respectivement  $\Delta T_a$  et  $\Delta T_{\text{max}}$ , ainsi qu'en densité de courant,  $\Delta J_{\text{max}}$ . Ces sauts interviennent à une valeur de champ seuil noté  $E_{\text{th}}$  dans la suite (indexé "th" pour *threshold* en anglais). Par ailleurs, en deçà de  $E_{\text{th}}$ , la température maximale est confondue avec la température au sommet, ce qui signifie que le sommet est bien le point le plus chaud de l'émetteur. En revanche, au-delà de  $E_{\text{th}}$ , la température maximale dépasse de manière significative la température au sommet. Ce constat peut paraître contre-intuitif au premier abord, étant donné que l'effet Joule est toujours maximal au sommet, là où la densité de courant est maximale.

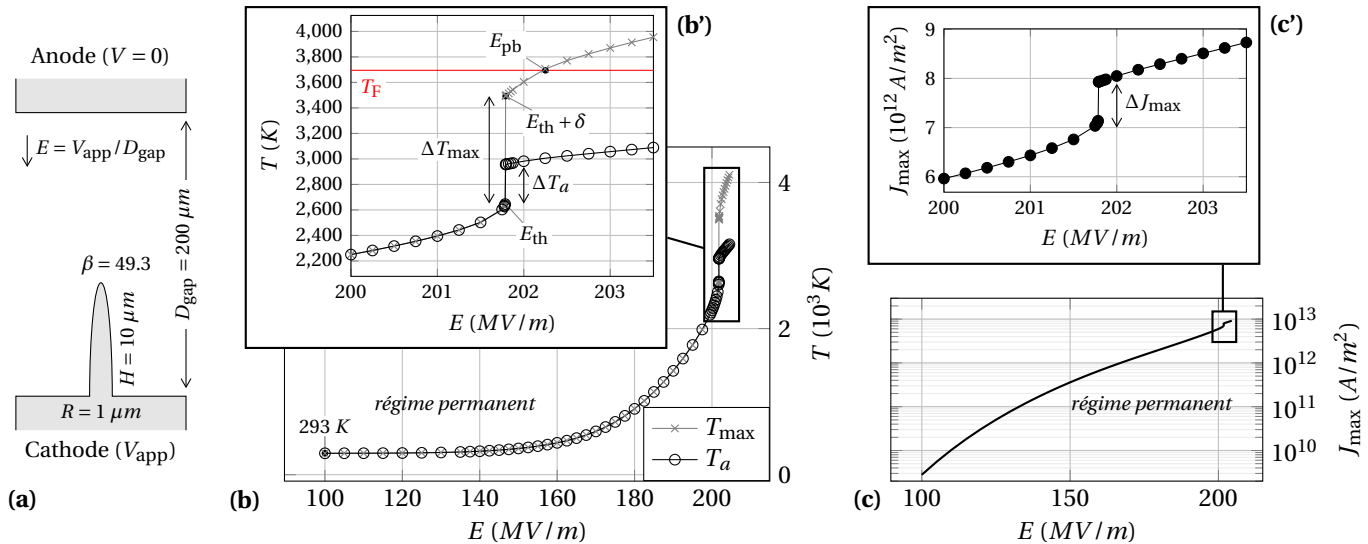


FIGURE 3.10 – Mise en évidence du saut en température en régime permanent avec l'augmentation du champ électrique, pour un émetteur hémisphérique en tungstène. (a) : schéma de l'émetteur.  $\beta$  est le renforcement de champ au sommet, de sorte que le champ localement renforcé au sommet s'exprime  $F_a = \beta E$ , où  $E$  est le champ appliqué. Les dimensions ne sont pas à l'échelle. (b) : Augmentation de la température maximale  $T_{max}$  et de la température au sommet  $T_a$  de l'émetteur en fonction du champ électrique. (c) : Augmentation de la densité de courant émise en fonction du champ électrique. (b') et (c') sont un agrandissement des zones encadrées en noir. Pour chaque graphique, un point de donnée est le résultat en régime permanent d'une simulation temporelle au cours de laquelle le champ a été monté en quelques nanosecondes depuis zéro jusqu'à la valeur indiquée en abscisse.

Toutes ces solutions ont bien évolué vers un régime permanent, mais il n'a pas été possible d'atteindre un équilibre avec  $T_a$  ou  $T_{max}$  dans la région du saut. C'est la raison pour laquelle ce saut est supposé être associé à une instabilité qui s'enclenche au delà de  $E_{th}$ . Raffiner l'échantillonnage du champ autour du seuil jusqu'à un pas de  $\delta = 5$  kV/m donne une valeur de  $E_{th} = 201.785$  MV/m. Les sauts correspondant en température valent alors  $\Delta T_{max} = 843$  K et  $\Delta T_a = 311$  K, ce qui signifie que la température maximale s'écarte de celle au sommet d'environ 500 K.

Après ce saut, il est important de noter que la température maximale n'a toujours pas dépassé la température de fusion. En ce sens, toutes les simulations sont physiquement valides jusqu'à ce qu'elles excèdent la ligne rouge à  $T_F = 3695$  K. Le champ de préclaquage correspondant est alors trouvé égal à  $E_{pb} = 202.25$  MV/m. Au-delà de  $E_{pb}$ , les simulations qui ont atteint un équilibre dans le cadre de notre modèle risqueraient en réalité d'évoluer vers la destruction thermique de l'émetteur selon un des scénarios décrits au chapitre 1, sous-section 1.3.

Les figures 3.11a et 3.11b montre la distribution volumique en température et la distribution surfacique de l'effet Nottingham respectivement à  $E_{th}$  et 5 kV/m au-dessus. De manière remarquable, une minuscule augmentation du champ électrique d'à peine +0.0025% ( $\delta = 5$  kV/m), correspondant à un changement de la densité de courant émise à 300 K de seulement +0.02%, est suffisant pour mener à des distributions complètement différentes en régime permanent. À  $E_{th}$ , la température maximale vaut 2650 K, quasiment identique à la température au sommet à 4 K près, et est situé à quelques nanomètres en dessous du sommet (Fig. 3.11a). À  $E_{th} + \delta$  à l'inverse, la température maximale atteint 3493 K, dépassant la température au sommet de 536 K, et a plongé d'environ 350 nm dans le volume de l'émetteur (Fig. 3.11b). Cette distribution de température avec la température maximale bien en dessous du sommet ressemble beaucoup à certains résultats de modélisation observés par Fursey et al. [6, 7] (plus de détails sur leur modèle physique sont donnés dans la sous-section 3.3.3 du livre de G. Fursey de 2005 [8]). Cette situation est due à l'effet Nottingham, qui devient refroidissant une

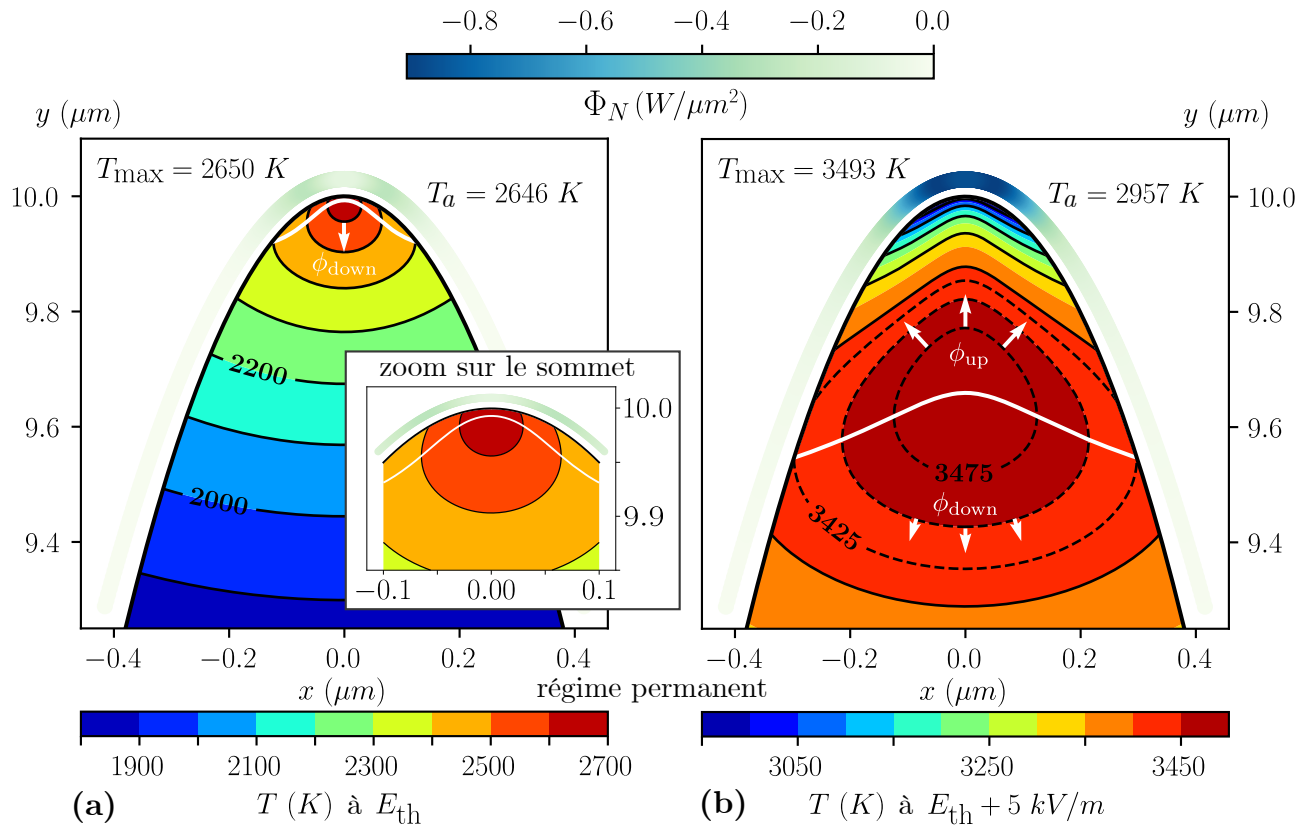


FIGURE 3.11 – Carte de couleur dans le plan axisymétrique du flux de chaleur Nottingham et de la température, avec une distribution d'isothermes (courbes noires). **(a)** et **(b)** : Régime permanent respectivement au champ électrique de seuil  $E_{th} = 201.785\text{ MV/m}$  et  $5\text{ kV/m}$  au-dessus (cf. Fig. 3.10b'). La carte de couleur du flux de chaleur Nottingham en surface a été légèrement décalée vers le haut pour améliorer la lisibilité et utilise une échelle de couleur commune. Les échelles de couleurs pour la température au contraire sont adaptées à chaque graphique. L'écart en température entre deux isothermes pleines est de  $100\text{ K}$ , et de  $25\text{ K}$  entre deux isothermes en tirets.  $T_a$  est la température au sommet. La ligne blanche épaisse délimite l'inversion du flux de chaleur selon la direction verticale  $z$ . Les flèches blanches associées mettent en évidence l'évacuation de chaleur vers le thermostat ( $\phi_{down}$ ) et le reflux de chaleur vers la surface d'émission ( $\phi_{up}$ ).



fois que les électrons émis emportent en moyenne plus d'énergie que n'apportent les électrons de remplacement. Cela arrive lorsque la température à la surface de l'émission dépasse la température d'inversion Nottingham  $T_N(F, \varphi)$  qui dépend du travail de sortie  $\varphi$  du matériau et du champ localement amplifié  $F$  (cf. 2.38). Dans notre cas précis,  $T_N = 2621 \text{ K}$  au sommet, où le champ électrique seuil donne un champ local  $F_a = \beta E_{\text{th}} = 9.95 \text{ GV/m}$ . Une fois la température de Nottingham dépassée au sommet de l'émetteur, ce dernier commence à évacuer de la chaleur. Par voie de conséquence, La température maximale s'enfonce en volume. Le détachement de la température maximale est à l'origine de la formation d'un domaine de haute température au sein duquel la température varie très peu, assimilable à la large région rouge foncé visible sur la figure 3.11b. La chaleur n'est alors plus uniquement évacuée vers le thermostat (le volume de la cathode – cf. les conditions aux limites sur la figure 6.7b). Une portion du volume de l'émetteur dissipe maintenant sa chaleur vers la surface d'émission. L'inversion du sens du flux de chaleur qui en résulte – dénommé "reflux" du fait de son orientation dans le sens opposé au thermostat – est noté  $\phi_{\text{up}}$ , par opposition au flux usuel diffusant la chaleur vers le thermostat que l'on note  $\phi_{\text{down}}$ . Ces deux termes sont représentés par des flèches blanches sur les figures 3.11a et 3.11b. Une épaisse ligne blanche marque l'annulation de la composante verticale du flux de chaleur ( $\phi_z = 0$ ). En délimitant ainsi le changement de sens du flux de chaleur dans la direction verticale, cette ligne divise le volume de l'émetteur en deux parties : une partie supérieure évacuant sa chaleur principalement par diffusion vers la surface d'émission (Effet Nottingham) et une partie inférieure diffusant essentiellement sa chaleur vers la base de l'émetteur (évacuation au thermostat). À partir de l'échelle de couleur de  $\Phi_N$  sur la figure 3.11, on peut voir que le flux de chaleur Nottingham est environ un ordre de grandeur plus dissipatif au-dessus de  $E_{\text{th}}$ . En terme de densité de flux de chaleur au sommet on a  $\Phi_N(F_a, T_a) = -0.09 \text{ W}/\mu\text{m}^2$  à  $E_{\text{th}}$  (Fig. 3.11a) contre  $\Phi_N(F_a, T_a) = -0.87 \text{ W}/\mu\text{m}^2$  à  $E_{\text{th}} + \delta$  (Fig. 3.11b). Cette différence explique pourquoi le second cas exhibe un net enfoncement de la température maximale dans le volume de l'émetteur, avec un large domaine où le reflux de chaleur domine. Cependant, cela n'explique pas pour autant comment un changement si faible en champ électrique (+0.0025% de  $E_{\text{th}}$  à  $E_{\text{th}} + \delta$ ) mène à une discontinuité si nette de la situation thermique à l'équilibre, avec une différence en température maximale de 30%. C'est cette discontinuité (saut entre deux états stables) qui nous amène à parler de bistabilité autour du champ seuil.

### 3.2.2 Emballlement transitoire au cours de l'autoéchauffement

Pour mieux saisir l'origine de cette bistabilité, étudions maintenant en détail l'évolution temporelle des simulations autour du champ seuil. Le premier élément qui ressort est que le saut se produit après l'inversion de l'effet Nottingham au sommet de l'émetteur. Ce passage à un flux refroidissant arrive d'abord aux extrémités de la surface d'émission (cf. la distribution de flux Nottingham sur la figure 3.11a). Le champ local étant maximal au sommet, il diminue à mesure qu'on s'en éloigne (cf. la distribution radiale de champ sur la figure 3.8). Cette diminution du champ induit une température d'inversion Nottingham plus faible. C'est la raison pour laquelle la ligne blanche sur les figures 3.11a et 3.11b se courbe vers le haut, indiquant la présence d'une composante radiale des flux de chaleurs.

Lorsque le champ électrique est suffisamment élevé, la température au sommet finit tout de même par dépasser le point d'inversion. Le flux de chaleur Nottingham devient alors refroidissant au sommet ce qui cause l'enfoncement de la position du maximum de température dans le volume de l'émetteur. Cela résulte en la formation d'un domaine de haute température dont la taille et la forme dépendent principalement de la géométrie de l'émetteur (plus particulièrement de son facteur d'aspect dans le cas d'un émetteur hémisphérique). Ce domaine peut être défini par une courbe isotherme fermée autour du point le plus chaud, à une valeur arbitrairement proche de  $T_{\text{max}}$ . En prenant l'isotherme à  $0.99 T_{\text{max}}$  (1% en deça de  $T_{\text{max}}$ ), le domaine a initialement la forme d'une goutte qui tomberait du sommet, puis évolue vers un sphéroïde que nous assimilons à un coeur chaud (*hot core* en anglais). Cette évolution est illustrée par les quatre images de la figure 3.12.

La différence entre les états stationnaires en deça et au delà de  $E_{\text{th}}$  réside dans ce passage à un

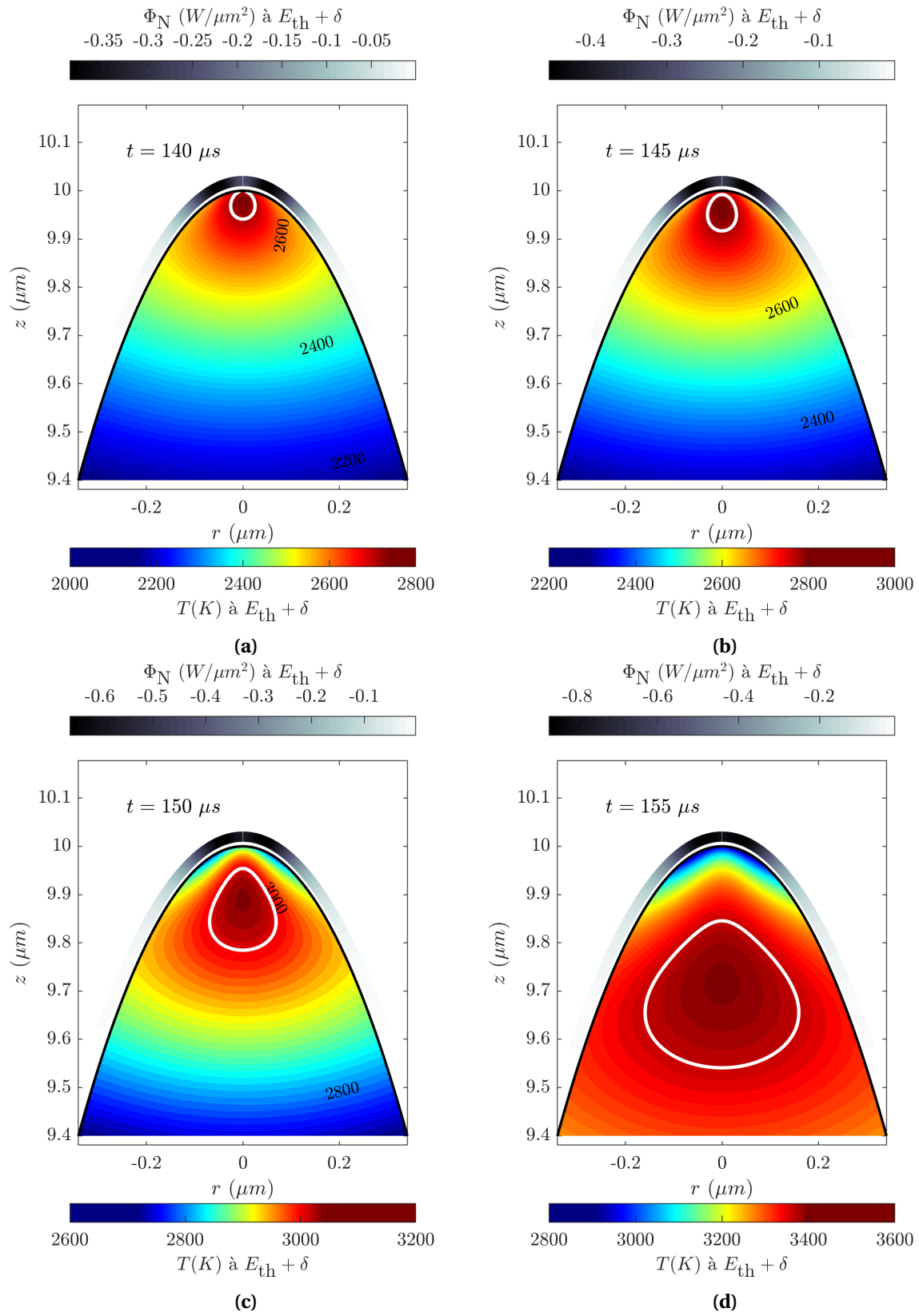


FIGURE 3.12 – Évolution du cœur chaud au cours de l'instabilité. L'isotherme en blanc définit une limite arbitraire à  $0.99 T_{\text{max}}$ . Les temps sélectionnés sont à relier aux graphiques (c2) et (d2) de la figure 3.13.

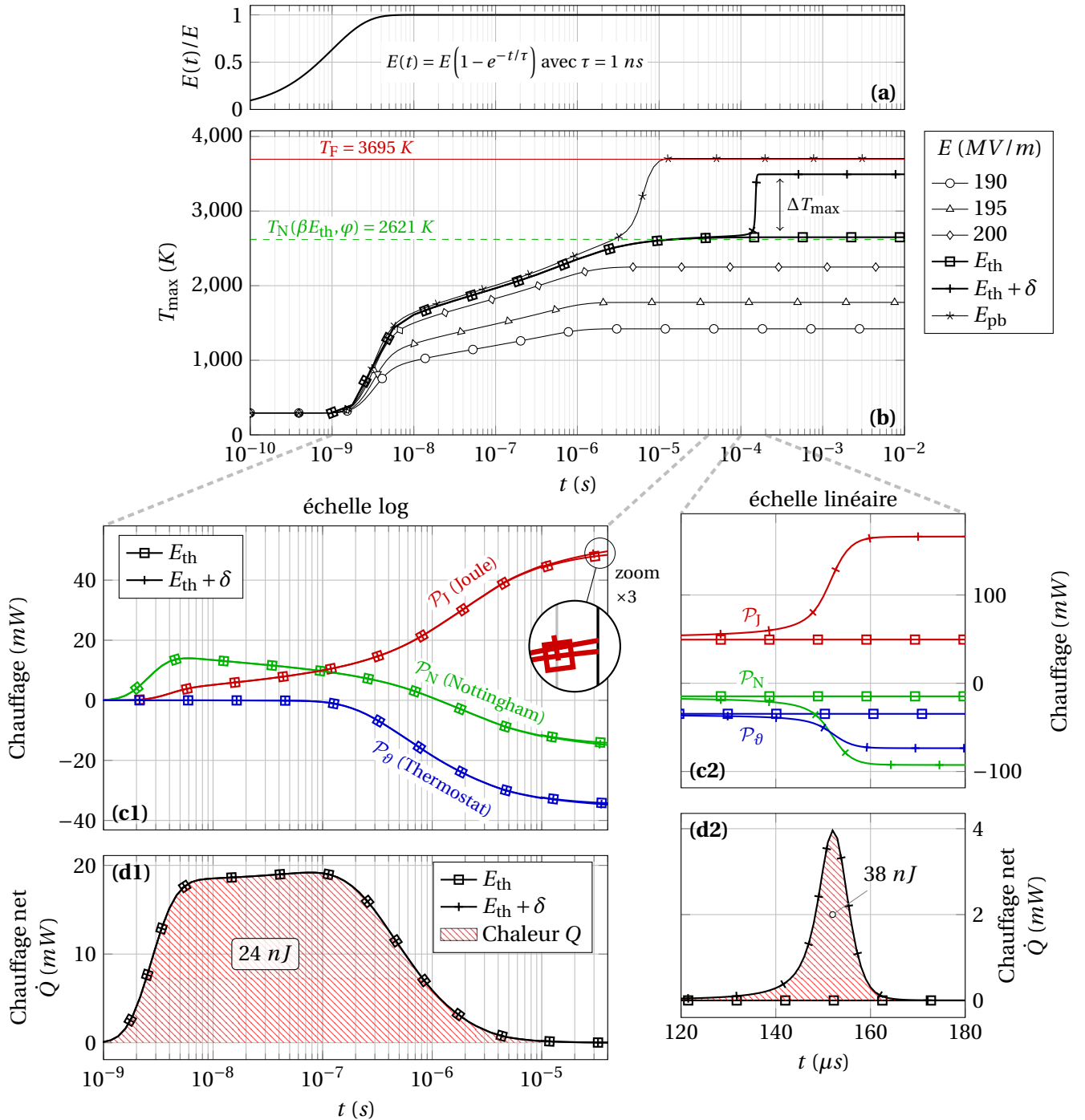


FIGURE 3.13 – Évolution de l'autoéchauffement. **(a)** : Montée en champ électrique pour chaque simulation, normalisé à 1. La constante de temps  $\tau$  est fixée à une nanoseconde. **(b)** : Évolution de la température maximale pendant l'auto échauffement, sous différents champs appliqués. Les évolutions à  $E_{\text{th}} = 201.785 \text{ MV/m}$  et  $E_{\text{th}} + \delta = 201.790 \text{ MV/m}$  sont respectivement marqués par des carrés et des signes plus.  $E_{\text{pb}} = 202.25 \text{ MV/m}$  est le champ de préclaquage. La ligne verte en tirets indique la température d'inversion Nottingham pour la valeur spécifique  $F = \beta E_{\text{th}}$  au sommet de l'émetteur. La ligne rouge rappelle la température de fusion du tungstène. **(c)** : Évolution détaillée à  $E_{\text{th}}$  et  $E_{\text{th}} + \delta$  de chaque grandeur globale de chauffage **(c1)** avant le saut (échelle log) et **(c2)** pendant le saut (échelle linéaire). **(d)** : Évolution du chauffage net à  $E_{\text{th}}$  et  $E_{\text{th}} + \delta$  **(d1)** avant le saut (échelle log) et **(d2)** après le saut (échelle linéaire). Le chauffage net est la somme des trois grandeurs de chauffage et son intégrale donne la chaleur nette accumulée (zone hachurée en rouge et son étiquette).

effet Nottingham refroidissant au sommet et l'enfoncement du maximum de température qui en résulte. Pour quantifier cette différence, la figure 3.13 détaille l'autoéchauffement *via* l'évolution des grandeurs thermiques à différentes valeurs de champ autour de  $E_{th}$ .

Chaque simulation temporelle s'étend ici de  $10^{-11}$  à  $10^{-2}$  s, avec un pas de temps logarithmique. La simulation prend également en compte un temps de montée du champ électrique visible sur le graphique 3.13a, comme expliqué au début du chapitre (*cf.* Eq. 3.1).

Le graphique 3.13b montre l'évolution de la température pour différents champs appliqués. En particulier, les évolutions pour  $E_{th}$  et  $E_{th} + \delta$  sont respectivement mises en évidence par des marqueurs carrés et des symboles plus. Les deux courbes suivent initialement un chemin identique, jusqu'à ce qu'une augmentation soudaine arrive pour  $E_{th} + \delta$ , menant au final à une température maximale en régime permanent bien plus élevée (3493 K contre 2650 K, soit un écart de 843 K). Cet écart peut être analysé *via* l'évolution des grandeurs globales de chauffage,  $\mathcal{P}_J$ ,  $\mathcal{P}_N$  et  $\mathcal{P}_\vartheta$  montrée sur les graphiques c1 et c2.  $\mathcal{P}_J$  et  $\mathcal{P}_N$  sont définies par les équations 3.2, tandis que  $\mathcal{P}_\vartheta$  peut être ré-écrit en utilisant  $\phi_{down}$  :

$$\mathcal{P}_\vartheta = - \iint_{base} \phi_{down} dS \quad (3.10)$$

La somme de ces trois termes donne le chauffage net  $\dot{Q}$  dont l'évolution est montrée sur les graphiques d1 et d2. La chaleur nette accumulée  $Q_y$  est aussi indiquée.

Si l'on s'intéresse d'abord au graphique c1, on voit qu'en dessous de  $10^{-4}$  s les deux champs électriques donnent une évolution très similaire, avec une chaleur accumulée de 24 nJ dans les deux cas. La seule différence visible est un effet Joule très légèrement supérieure à partir de  $10^{-5}$  s (*cf.* zoom sur le graphique c1). Cette très petite différence cependant dégénère rapidement vers un emballement du chauffage résistif (rétroaction positive de la température sur l'effet Joule) qui s'observe nettement sur le graphique c2 pour  $E_{th} + \delta$  après une centaine de microsecondes. Cet emballement est ensuite freiné par une boucle de rétroaction négative : un effet Nottingham plus refroidissant à température plus élevée et une plus forte diffusion thermique vers le thermostat du fait de l'accroissement (local et temporaire) des gradients de température. La chaleur nette qui en résulte sur le graphique d2 illustre clairement l'apparition de l'emballement puis sa conséquente extinction. C'est ce surplus de chauffage temporaire qui est à l'origine de la transition discontinue d'un régime permanent (à  $E_{th}$ ) à un autre (à  $E_{th} + \delta$ ), avec un écart significatif en énergie thermique accumulée. La courbe à  $E_{th} + \delta$  sur le graphique d2 (marqueurs plus) indique en effet l'accumulation de 38 nJ supplémentaire en 20  $\mu$ s (entre  $t = 140$  et 160  $\mu$ s) qui viennent s'ajouter au 24 nJ initiaux, tandis que la courbe à  $E_{th}$  (marqueurs carrés) a déjà atteint un régime permanent. Ainsi, une simple variation de +0.0025% produit un surplus de chaleur local de +158%.

Par ailleurs, que le champ monte initialement à  $E_{th} + \delta E$  ou qu'il soit augmenté de  $\delta E$  au temps  $t_0$  après une première montée à  $E_{th}$  selon l'expression :

$$E(t) = E_{th} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) \right] + \delta(t) \quad \text{avec} \quad \delta(t) = \frac{\delta}{2} \left[ 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{t - t_0}{\tau_2}\right) \right], \quad (3.11)$$

un emballement thermique similaire s'enclenche. C'est ce que montre la figure 3.14, pour  $\tau_1 = 1$  ns,  $\tau_2 = 10$  ns et  $t_0 = 500$   $\mu$ s. Le pas de temps est alors ponctuellement réduit à quelques nanosecondes autour de  $t_0$  (graphique a') puis remonté à quelques microsecondes au-delà de  $t_0 + 20$  ns pour capter l'enclenchement de l'instabilité. Celle-ci se développe une centaine de microsecondes après la montée de  $\delta E$ , et le surplus de chauffage dure une vingtaine de microsecondes (graphique d2), comme dans le cas précédent. La situation atteinte en régime permanent est là aussi la même, avec la température maximale de 3493 K.

En revanche, pour des incréments de champ  $\delta E > \delta$  au-dessus du champ seuil  $E_{th}$ , l'emballement thermique apparait plus rapidement, dégénère sur une durée plus courte, et mène à un surplus de chaleur plus important. Par exemple, la figure 3.15 montre qu'à  $E_{pb} = 202.25$  MV/m, l'emballement s'enclenche dès  $t = 1$   $\mu$ s. Il apporte un surplus de chaleur de  $\sim 50$  nJ en tout juste dix microsecondes

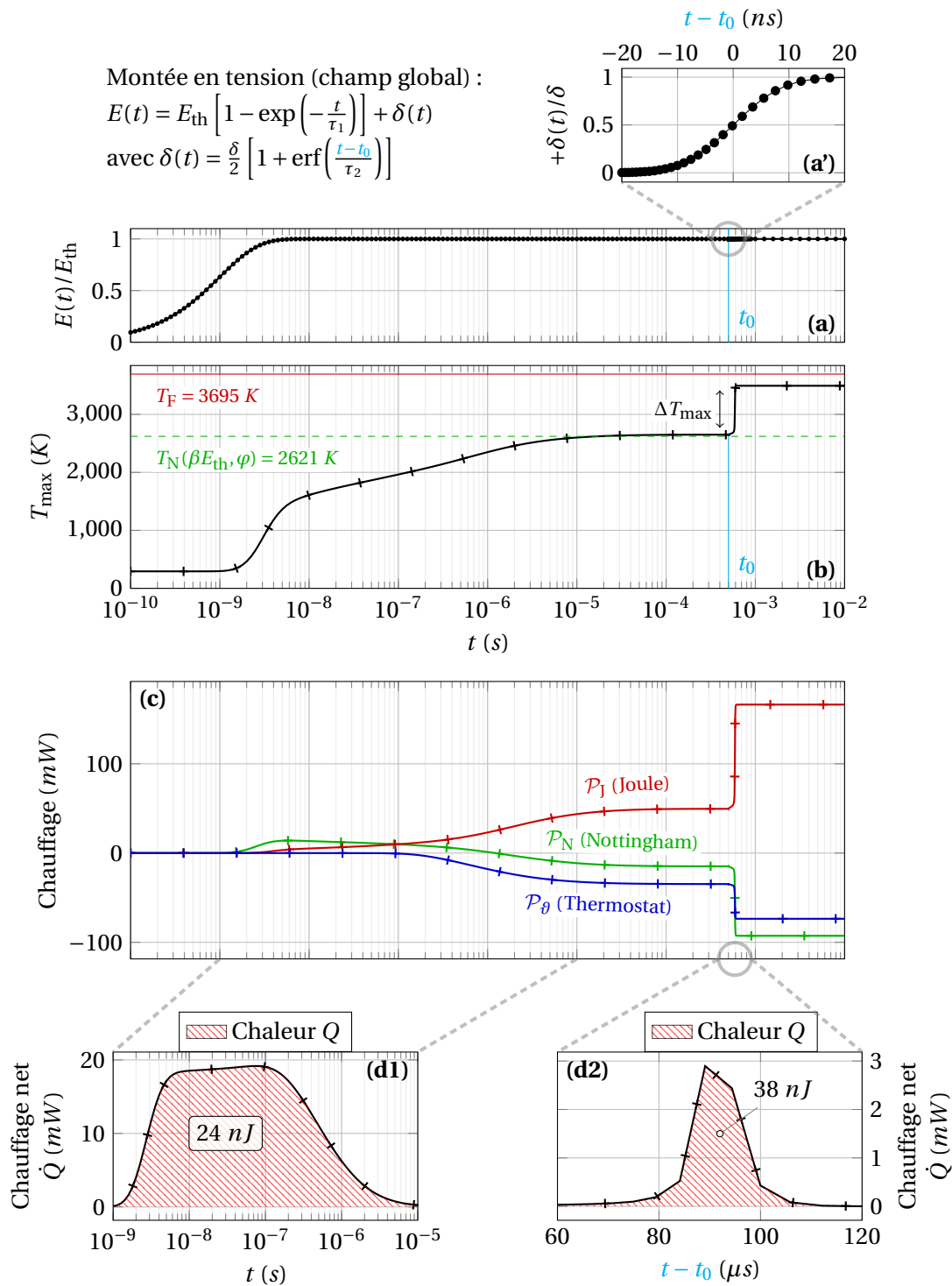


FIGURE 3.14 – Évolution de l'autoéchauffement quand le champ est augmenté de  $\delta = 5 \text{ kV/m}$  à un temps donné  $t_0$  (mis en évidence en couleur cyan), après une montée initiale à  $E_{th}$ . **(a)** : Montée du champ électrique global normalisé par  $E_{th}$ . Les constantes de temps sont  $\tau_1 = 1 \text{ ns}$ ,  $\tau_2 = 10 \text{ ns}$  et  $t_0 = 500 \text{ }\mu\text{s}$ . **(a')** Zoom sur l'augmentation du champ selon  $\delta(t)$  autour de  $t_0$  (échelle de temps linéaire). **(b)** : Évolution de la température maximale au cours de l'autoéchauffement. **(c)** : Évolution détaillée de chaque terme de chauffage global. **(d1)** : Chauffage net avant l'augmentation par  $\delta$ . **(d2)** : Chauffage net après l'augmentation par  $\delta$ .

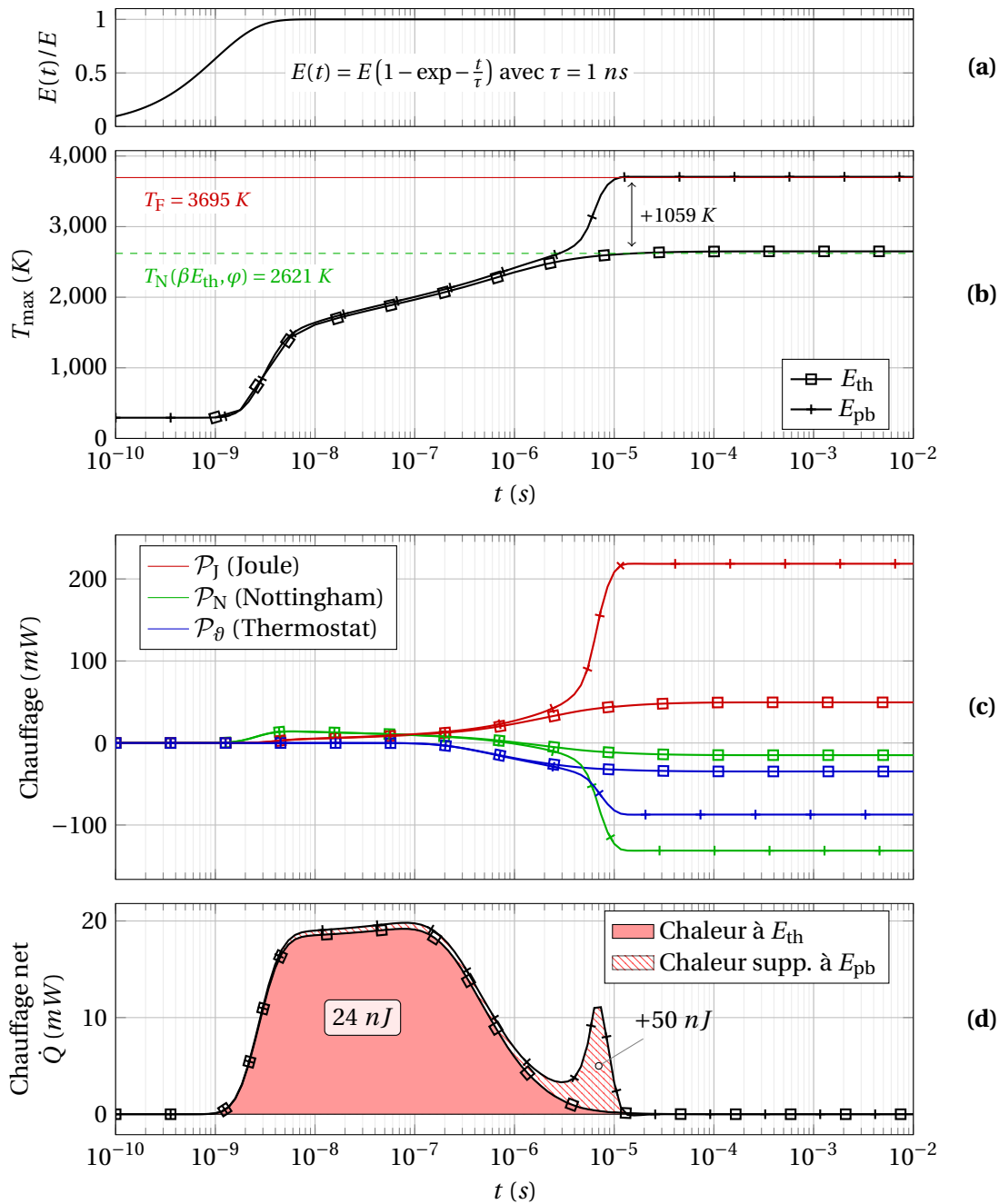


FIGURE 3.15 – Évolution de l’autoéchauffement à  $E_{pb}$ . (a) : Montée du champ électrique global, normalisé à 1. La constante de temps  $\tau$  vaut une nanoseconde. (b) : Évolution de la température maximale au cours de l’autoéchauffement à  $E_{th} = 201.785 \text{ MV/m}$  (marqueurs carrés) et à  $E_{pb} = 202.25 \text{ MV/m}$  (symboles plus).  $E_{th}$  est le champ électrique seuil de l’instabilité tandis que  $E_{pb}$  est le champ de préclaquage. (c) : Évolution détaillée de chaque terme de chauffage global. (d) : Évolution du chauffage net.

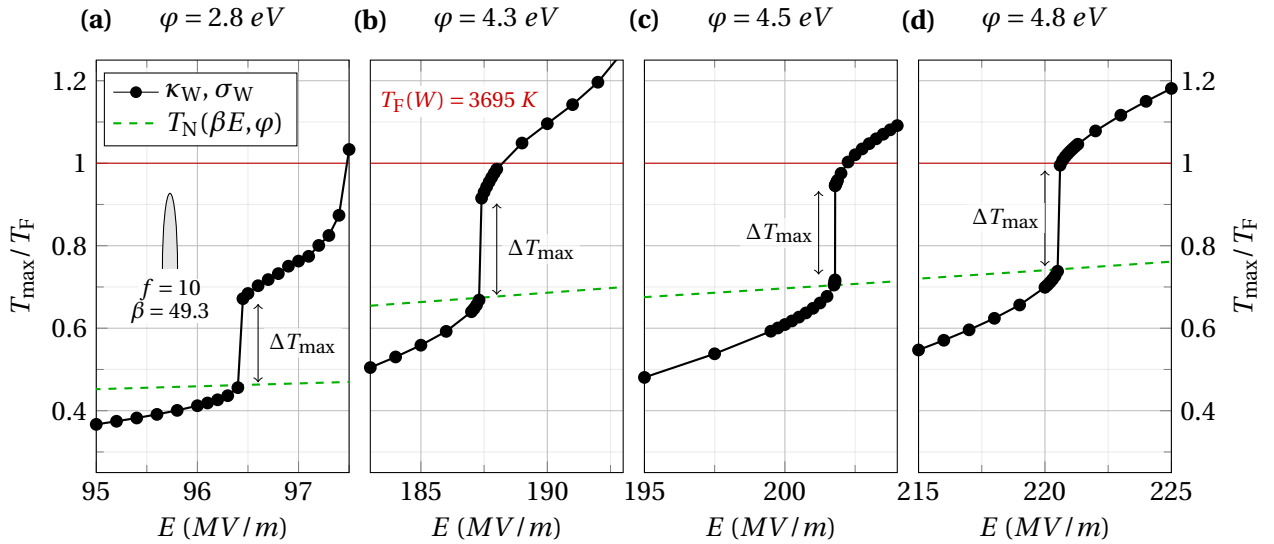


FIGURE 3.16 – Variation de la température maximale d'un émetteur en tungstène hémipellipsoïde de hauteur  $H$  et de facteur d'aspect  $f = 10$  pour quatre différents travaux de sortie. (a) :  $\varphi = 2.8 \text{ eV}$  correspond au travail de sortie du tungstène thorié [9]. Les graphiques (b), (c) et (d) explorent trois différentes valeurs qui reprennent la variation du travail de sortie du tungstène en fonction de son orientation cristalline.  $\varphi = 4.3 \text{ eV}$  et  $\varphi = 4.8 \text{ eV}$  correspondent à peu près aux valeurs minimum et maximum indiquées dans le tableau 1 de la référence [10].  $\varphi = 4.5 \text{ eV}$  est la valeur polycristalline admise pour le tungstène [9, 11].

(contre une vingtaine à  $E_{\text{th}}$ ). La température maximale atteint alors le point de fusion, enclenchant très certainement une destruction thermique de l'émetteur que notre modèle ne décrit pas.

Plus globalement, une déviation si brutale de l'autoéchauffement rend l'émetteur thermiquement instable à l'approche du champ de seuil  $E_{\text{th}}$  et favorise un scénario de destruction thermique par explosion de l'émetteur, impliquant une projection de matière.

### 3.2.3 Influence des paramètres de l'émetteur

Pour mieux comprendre les mécanismes sous-jacents à l'origine de l'emballement thermique et de la bistabilité, il est important d'étudier l'influence des paramètres de l'émetteur.

#### Influence du travail de sortie

Pour isoler l'effet du travail de sortie, la figure 3.16 montre l'augmentation avec la tension de la température maximale en régime permanent jusqu'au champ de préclaquage pour un émetteur inchangé :  $H = 10 \mu\text{m}$ ,  $f = 10$ , propriétés du tungstène (à l'exception de  $\varphi$ ). Pour les trois nouvelles valeurs de travail de sortie testées, 2.8, 4.3 et 4.8 eV on observe bien un saut en température. Il faut noter ici cependant que l'incrément sur le champ  $E$  n'a pas été raffiné jusqu'à la précision précédente de  $\delta = 5 \text{ kV/m}$ , ce qui empêche la comparaison très précise de l'amplitude des sauts. Ceci étant dit, aucune tendance nette ne se dégage entre les différentes valeurs de  $\varphi$  : le travail de sortie ne conditionne pas l'apparition du saut, et n'influence pas de manière significative son amplitude.

On peut tout de même noter que le travail de sortie modifie la température d'inversion Nottingham. Le sens de cette modification n'est en revanche pas évident. Rappelons que la température d'inversion se comporte en première approximation selon  $T_N \propto F/\varphi^{1/2}$  (cf. Eq. 2.38). Par conséquent, toutes choses égales par ailleurs, un travail de sortie plus faible augmente la température d'inversion. Cependant, dans la pratique, toutes choses ne sont pas égales par ailleurs, et un travail de sortie plus petit permet une émission à des champs électriques bien plus faible ce qui réduit la température d'inversion. On voit alors sur les graphiques de la figure 3.16 que l'influence du champ électrique l'emporte, et la température d'inversion Nottingham au sommet de l'émetteur (courbe verte discontinue)

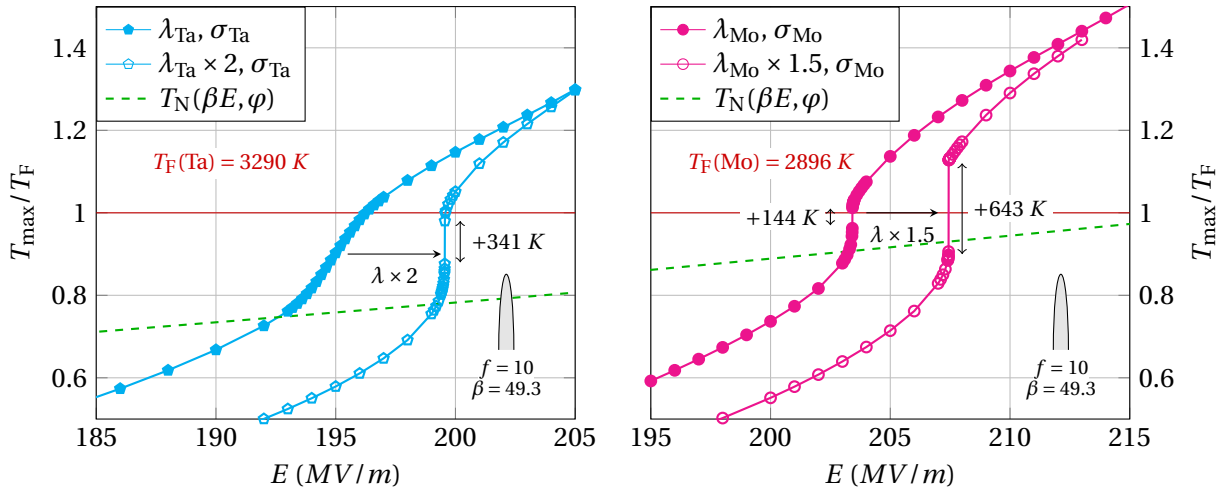


FIGURE 3.17 – Variation de la température maximale avec le champ électrique appliqué pour les cas sélectionnés. Les températures sont normalisées par la température de fusion  $T_F$  du matériau. **(a)** : Géométrie initiale ( $H = 10 \mu m$ ,  $R = 1 \mu m$  et  $f = 10$ ) avec les conductivités électriques et thermiques du tantale,  $\sigma_{Ta}$  et  $\lambda_{Ta}$ , comparée au même émetteur avec une conductivité thermique augmentée d'un facteur deux,  $\lambda_{Ta} \times 2$ . **(b)** : Même géométrie avec les conductivités électriques et thermiques du Molybdène,  $\sigma_{Mo}$  et  $\lambda_{Mo}$ , comparée au même émetteur avec une conductivité thermique augmentée,  $\lambda_{Mo} \times 1.5$ .

est *in fine* plus faible pour les travaux de sortie plus petits. Le saut apparaît alors à des températures plus faibles et semble corrélé au dépassement de la température d'inversion  $T_N$ .

### Influence des conductivités électriques et thermique

A partir d'ici, le travail de sortie est donc à nouveau fixé à  $4.5 eV$  pour faciliter la comparaison et permettre d'isoler l'importance des autres paramètres matériau.

Toujours à travers l'augmentation de la température maximale en régime permanent avec la tension appliquée (champ électrique globale  $E$ ), la figure 3.17 teste l'influence des conductivités sur la stabilité thermique des émetteurs à travers quatre cas.

Le premier cas considère un émetteur en tantale. Les conductivités thermiques et électriques du tantale sont environ deux fois plus faibles que celles du tungstène (*cf.* annexe H, Fig. H.1). L'augmentation de la température avec le champ est ici continue au niveau du passage de la température d'inversion Nottingham, bien que ce passage soit corrélé avec un net accroissement de la dérivée (*cf.* graphique 3.17a : la courbe cyan marquée par des pentagones remplis). Augmenter le champ global dans ce cas donne bien un effet Nottingham plus refroidissant ce qui fait toujours s'enfoncer plus profondément la température maximale. La différence est qu'ici, toutes les valeurs de température maximale sont atteignables en régime permanent, et les positions correspondantes le long de l'axe de l'émetteur sont stables : il n'y a pas d'emballage du chauffage résistif.

Pour tester l'influence de la conductivité thermique, le second cas considère un émetteur en tantale avec une conductivité thermique artificiellement accrue d'un facteur 2, qui devient alors très proche de celle du tungstène. Bien que la conductivité électrique soit elle toujours environ deux fois plus faible que celle du tungstène, cette manipulation numérique fait apparaître un saut en température comme on peut le voir sur la seconde courbe du graphique 3.17a (courbe cyan avec des pentagones vides). Ce constat soutient un lien causal contre-intuitif entre la conductivité thermique et l'emballage du chauffage résistif au champ de seuil, indépendamment de la conductivité électrique.

Les deux derniers cas sont présentés sur le graphique 3.17b et considèrent un émetteur en molybdène. Comparées au tantale, les conductivités  $\lambda_{Mo}$  et  $\sigma_{Mo}$  du molybdène sont très proches de celles



du tungstène (cf. annexe H, Fig. H.1). La courbe correspondante (courbe magenta avec des cercles remplis) sur le graphique 3.17b présente bien un saut en température, toujours relié à un emballlement transitoire du chauffage résistif. Le saut est en revanche d'amplitude moindre que dans le cas du tungstène :  $\Delta T_{\max} = 144 \text{ K}$  (avec un raffinement de l'incrément du champ à  $\delta = 5 \text{ KV/m}$ ). Notre explication est la suivante : Bien que la conductivité thermique du molybdène soit très légèrement supérieure à celle du tungstène, c'est aussi le cas de sa conductivité électrique d'environ 10%. Par conséquent, toutes choses égales par ailleurs, le molybdène génère aussi  $\sim 10\%$  de moins de chauffage résistif ce qui résulte en un freinage de l'emballlement plus rapide et explique le plus faible saut en température.

Pour le dernier cas, la conductivité thermique est à nouveau artificiellement augmentée, cette fois-ci d'un facteur 1.5 (courbe magenta avec des cercles vides). Ceci a pour effet d'accroître significativement l'amplitude du saut, qui passe alors à  $\Delta T_{\max} = 643 \text{ K}$ . Ce résultat vient appuyer l'influence de la conductivité thermique sur l'instabilité. Par ailleurs, cette influence pourrait expliquer pourquoi, dans la section précédente, les émetteurs en titane ne présentaient pas de discontinuité en régime permanent avec l'augmentation du champ électrique. En effet, on peut voir sur la figure H.1 (en annexe H) que le titane présente une conductivité thermique à peu près quatre fois plus faible que le molybdène ou le tungstène (et deux fois plus faible que le tantale).

Il est aussi intéressant de noter qu'une seconde conséquence de l'augmentation de la conductivité thermique que l'on voit sur les deux graphiques de la figure 3.17 est que l'émetteur requiert alors un champ plus fort (un chauffage volumique plus important) pour atteindre une situation thermique équivalente, ceci du fait d'une évacuation thermique accrue en moyenne (qui induit un temps de chauffage moindre).

### Influence de la géométrie

Passons maintenant à l'influence de la géométrie que nous étudierons à travers la hauteur et le facteur d'aspect. Pour cette étude, nous fixons les propriétés matériaux à celles du molybdène, avec comme référence le cas à  $H = 10 \mu\text{m}$  et  $f = 10$  que l'on retrouve sur le graphique (a) de la figure 3.18.

Comme on l'a vu dans la section précédente, l'échelle de la pointe et son ratio volume sur surface  $S/V$  impacte les phénomènes de chauffage. On s'attend donc à ce que changer le facteur d'aspect *via* le rayon ou la hauteur n'influence pas le saut de la même manière.

Pour une héliellipse, on a les relations géométriques suivantes :

$$S = \pi R^2 \left( 1 + \frac{H \arcsin(e)}{R e} \right), \quad V = \frac{2\pi}{3} R^2 H, \quad \frac{S}{V} = \frac{3}{2} \left( \frac{1}{H} + \frac{1}{R} \frac{\arcsin(e)}{e} \right), \quad \text{où } e^2 = 1 - \frac{1}{f^2} \quad (3.12)$$

Où  $e$  est l'excentricité. Comme  $e$  est rapidement très proche de l'unité quand  $f$  est bien supérieur à un, le ratio surface sur volume peut être considéré comme inversement proportionnel à  $R$  et à  $H$  :

$$\frac{S}{V} \simeq \frac{3}{2} \left( \frac{1}{H} + \frac{1}{R} \right) \quad (3.13)$$

Toutefois, dans les cas qui nous intéressent, la hauteur est toujours supérieure au rayon.  $R$  est donc plus proche de zéro que  $H$  ce qui fait que, compte tenu du comportement de la fonction inverse, changer le rayon impactera beaucoup plus le ratio surface sur volume que changer la hauteur.

En gardant le rayon fixe à un micromètre, les graphiques (a), (b) et (c) présente ainsi l'influence du facteur d'aspect sur l'instabilité à un rapport surface sur volume quasiment constant :  $\frac{S}{V} \simeq 2.4 \mu\text{m}^{-1}$ . En comparaison au graphique (a), le graphique (b) montre qu'un facteur d'aspect plus grand de  $f = 16$  supprime le saut : l'augmentation avec la température devient continue. À l'inverse, le graphique (c) montre qu'un facteur d'aspect plus faible de  $f = 6$  accroît significativement le saut en

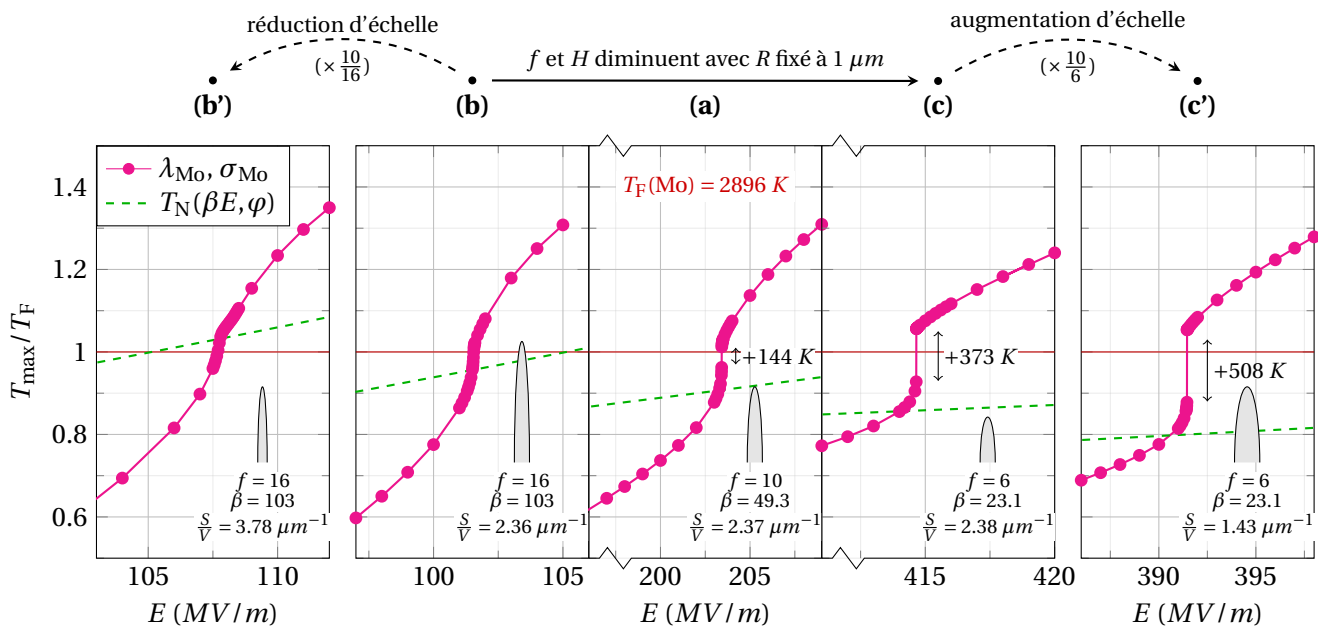


FIGURE 3.18 – Variation de la température maximale avec le champ électrique appliqué pour les cas sélectionnés. Les températures sont normalisées par la température de fusion  $T_F$  du matériau. **(a)** : Géométrie initiale avec les conductivités du molybdène  $\sigma_{Mo}$  et  $\lambda_{Mo}$ . **(b)** : Géométrie plus profilée avec  $f = 16$ , obtenue en augmentant la hauteur. **(b')** : Géométrie plus profilée avec  $f = 16$  obtenu en diminuant le rayon. **(c)** : Géométrie moins profilée avec  $f = 6$  obtenu en diminuant la hauteur **(c')** : Géométrie moins profilée avec  $f = 6$  obtenu en augmentant le rayon. L'amplitude des sauts en température est donnée avec le champ seuil déterminé à partir d'un pas de  $\delta = 5 K V / m$ . La variation de la température de Nottingham  $T_N$  avec le champ électrique local au sommet de l'émetteur  $F_a = \beta E$  est aussi indiquée sur chaque graphique. Toutes les simulations ont été faites avec le même travail de sortie  $\varphi = 4.5 eV$  pour simplifier la comparaison.

température. Bien que le lien entre le facteur d'aspect d'une hémicellipsoïde et l'ensemble des géométries d'émetteurs possibles est limité, le résultat reste instructif : globalement, un facteur d'aspect plus grand implique une distribution de champ plus piqué au sommet, et une proportion de surface émissive plus faible (cf. figure 3.8 et 3.9). Ces deux éléments semblent donc agir contre l'emballement transitoire du chauffage résistif.

Enfin, les graphiques (b') et (c') mettent en évidence l'influence de la taille et du ratio surface sur volume. En effet, les émetteurs ont respectivement le même facteur d'aspect que sur les graphiques (b) et (c), mais ont été obtenus à partir du graphique (a) en changeant le rayon plutôt que la hauteur. On peut donc les voir comme un simple changement d'échelle par rapport aux graphiques (b) et (c).

- Le graphique (b') montre qu'une réduction d'échelle restreint l'autoéchauffement : l'augmentation de la température avec le champ devient légèrement plus graduelle autour du passage de la température d'inversion (ligne verte discontinue) et le champ requis pour atteindre une situation thermique équivalente augmente.
- À l'inverse, l'augmentation de l'échelle sur le graphique (c') accroît le saut en température que l'on observait déjà sur le graphique (c) et réduit le champ seuil.

On peut relier ces deux constats avec le lien précédemment établi entre temps typique de diffusion thermique et taille de la pointe : les pointes plus petites ont tendance à évacuer plus rapidement la chaleur menant à des temps de chauffage plus courts. À cet argument s'ajoute le fait que l'emballement thermique est causé par l'effet Joule, un chauffage en volume qui bénéficie du ratio surface sur volume plus faible des émetteurs plus grands.

D'un point de vue plus général cette dernière analyse rappelle que – toutes choses égales par ailleurs – plus l'échelle des émetteurs est grande, plus leur destruction thermique est probable. Ainsi, quel que soit le moyen utilisé, réduire l'échelle des aspérités au niveau des électrodes devrait toujours aider les appareils sous vide à tenir de plus hautes tensions.

### 3.2.4 Discussion sur les conditions de la bistabilité

Il est intéressant de noter que pour toutes les courbes exhibant un saut en température sur les figures 3.16, 3.17 et 3.18, l'emballement résistif sous-jacent est corrélé à un effet Nottingham devenu globalement refroidissant comme l'indique le dépassement de la ligne verte discontinue. Cette corrélation avec l'inversion Nottingham au sommet, à laquelle s'ajoute l'effet contre-intuitif de l'emballement résistif favorisé par une conductivité thermique accrue, a mené à l'hypothèse d'un déclenchement de l'instabilité Joule par l'inversion du flux de chaleur Nottingham. Cette hypothèse est explicitée dans la section *Discussion* de l'article que nous avons publié sur le sujet [1].

Cependant, après discussion avec les rapporteurs de cette thèse (en particulier M. Bruno Lepetit que nous remercions pour sa lecture attentive), des simulations supplémentaires ont été faites. La figure 3.19 montre la variation de la température maximale atteinte dans l'émetteur en régime permanent en fonction du champ électrique appliqué pour trois considérations différentes de l'effet Nottingham. La courbe grise (marqueur en croix) correspond à la prise en compte normale de l'effet Nottingham (cf. 3.10b). La courbe orange avec les marqueurs ronds correspond à une prise en compte de l'effet Nottingham chauffant uniquement : la densité de flux de chaleur Nottingham est prise nulle une fois la température d'inversion dépassée. Enfin, la courbe marron (marqueurs triangulaires) correspond à la température maximale atteinte en l'absence d'effet Nottingham (chauffage résistif uniquement).

Pour les trois courbes, on voit l'enclenchement d'un emballement résistif au delà d'une valeur de champ seuil mise en évidence. Il apparaît donc clair que l'instabilité Joule (l'emballement résistif) ne requiert par l'inversion du flux de chaleur Nottingham pour se déclencher.

En comparant les deux dernières courbes (marqueurs ronds et triangles), on voit que la contribution du chauffage Nottingham ( $\Phi_N > 0$ ) permet d'atteindre une température bien plus haute à champ

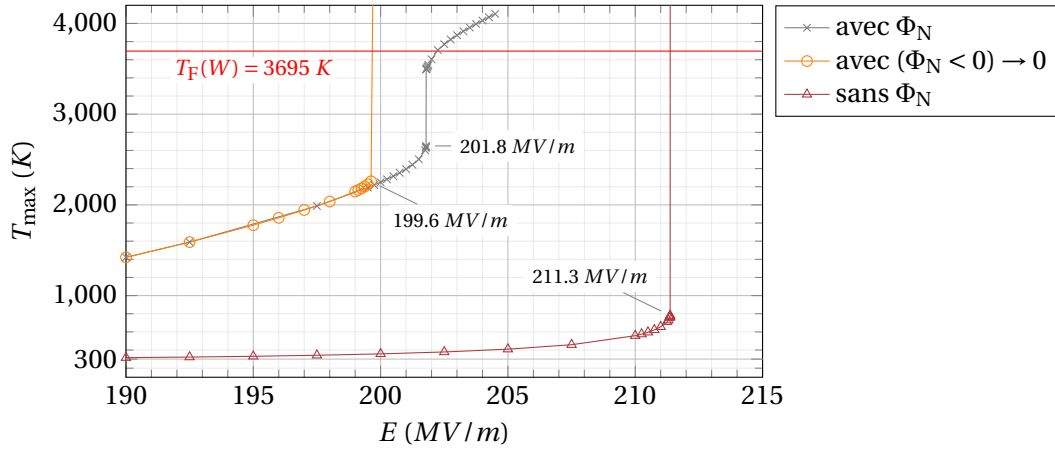


FIGURE 3.19 – Variation avec le champ électrique appliqué de la température maximale en régime permanent pour différentes prise en compte de l'effet Nottingham : avec effet Nottingham (croix), avec un effet Nottingham uniquement chauffant (cercles), et sans effet Nottingham (triangles).

plus faible. Par ailleurs, cette augmentation de la température par l'effet Nottingham bénéficie au chauffage résistif qui s'emballe dès  $199.6 \text{ MV/m}$ , là où il faut attendre  $211.3 \text{ MV/m}$  en l'absence d'effet Nottingham.

En revanche, la prise en compte d'un effet Nottingham refroidissant (courbe grise) repousse le déclenchement de l'emballement résistif qui intervient alors à  $201.785 \text{ MV/m}$ . Plus important encore, une fois cet emballement déclenché, la boucle de rétroaction négative de l'effet Nottingham avec la température compense l'emballement résistif et mène vers un nouvel équilibre en régime permanent. C'est la raison pour laquelle nous proposons d'appeler ce mécanisme la bistabilité d'inversion Nottingham.

Pour préciser les conditions nécessaires à l'observation de cette bistabilité, il est intéressant de réduire temporairement le problème à un bilan au niveau de la pointe entière, avec  $T$  une distribution 2D de température donnée<sup>4</sup>. Le chauffage de l'émetteur s'écrit :

$$\dot{Q}(E, T) = \mathcal{P}_J + \mathcal{P}_N + \mathcal{P}_\theta \quad (3.14)$$

Partons d'un régime stationnaire au temps  $t$  :

$$\dot{Q}(E, T(t)) = 0 \quad (3.15)$$

et perturbons le système par une très faible augmentation du champ  $\delta E$  (situation similaire à celle de la figure 3.14). En faisant ainsi, on accroît instantanément la densité de courant émise, ce qui se traduit par une augmentation  $\delta \dot{Q}$  du chauffage :

$$\delta \dot{Q}(t) := \dot{Q}(E + \delta E, T(t)) - \underbrace{\dot{Q}(E, T(t))}_0 = \left. \frac{\partial \dot{Q}}{\partial E} \right|_{E, T(t)} \cdot \delta E + \mathcal{O}(\delta E^2) \quad (3.16)$$

que l'on peut simplifier ainsi :

$$\delta \dot{Q} = \frac{\partial \dot{Q}}{\partial E} \cdot \delta E \quad (3.17)$$

Cette augmentation initiale  $\delta \dot{Q}$  du chauffage va nécessairement causer dans le temps une augmentation  $\delta T$  de la température que l'on peut exprimer à l'aide de la capacité thermique moyenne  $C_V$  de l'émetteur au temps  $t$  :

$$T(t + dt) = T(t) + \frac{\delta \dot{Q}(t)}{C_V} \cdot dt \quad (3.18)$$

4. Le raisonnement qui suit a été fortement inspiré par les discussions avec M. Bruno Lepetit, rapporteur de cette thèse. Qu'il en soit ici remercié.

D'où :

$$\dot{T}(t) := \frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q}(E + \delta E, T(t))}{C_V} \quad (3.19)$$

Le chauffage et le courant émis dépendant eux-mêmes de la température, on peut capter cette rétroaction en regardant l'évolution du chauffage au temps  $t + dt$  :

$$\dot{Q}(E + \delta E, T(t + dt)) = \dot{Q}(E + \delta E, T(t)) + \frac{\partial \dot{Q}}{\partial T} \cdot \dot{T}(t) \cdot dt \quad (3.20)$$

$$\Rightarrow \boxed{\ddot{Q}(E + \delta E, T(t)) = \frac{1}{C_V} \frac{\partial \dot{Q}}{\partial T} \cdot \dot{Q}(E + \delta E, T(t))} \quad (3.21)$$

Pour que le système soit stable (retourne rapidement vers un régime permanent avec  $\dot{Q} \rightarrow 0$ ), il faut alors que  $\ddot{Q} < 0$ , ou de manière équivalente :

$$\frac{\partial \dot{Q}}{\partial T} < 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial \mathcal{P}_J}{\partial T} + \frac{\partial \mathcal{P}_N}{\partial T} + \frac{\partial \mathcal{P}_\theta}{\partial T} < 0 \quad (3.22)$$

Détaillons alors la contribution de chacun des termes à cette inégalité :

- Une augmentation de la température accroît la résistivité électrique et la densité de courant émise ce qui ne peut qu'augmenter l'effet Joule.

$$\text{L'effet Joule est déstabilisant} \Rightarrow \frac{\partial \mathcal{P}_J}{\partial T} > 0$$

- Une augmentation de la température augmente la densité de courant émise mais diminue l'énergie Nottingham (2.33). Pour la gamme de champ et de température exploré dans cette thèse, on trouve systématiquement que l'effet Nottingham diminue avec la température.

$$\text{L'effet Nottingham est stabilisant} \Rightarrow \frac{\partial \mathcal{P}_N}{\partial T} < 0$$

- Une augmentation de la température diminue la conductivité thermique mais accroît le gradient entre l'émetteur et le thermostat et favorise donc l'évacuation thermique. S'il n'est pas évident de savoir lequel de ces deux effets l'emporte sur la densité de flux de chaleur local, l'évolution de  $\mathcal{P}_\theta$  à mesure que la température augmente sur les figures 3.13, 3.14 et 3.15 (courbes bleues) indique que la dérivée est négative pour la diffusion à l'échelle globale.

$$\text{La diffusion thermique est stabilisante} \Rightarrow \frac{\partial \mathcal{P}_\theta}{\partial T} < 0$$

La stabilité thermique de l'émetteur face à une perturbation  $\delta E$  dépend de la compétition entre ces trois dérivés. L'évolution de  $\dot{Q}$  sur la figure 3.13 montre que la bistabilité d'inversion Nottingham se déroule en deux phases qui peuvent être décrites comme suit dans le formalisme introduit :

1. Une première phase d'instabilité qui s'enclenche à  $E_{th} + \delta$  où, pour la première fois,  $|\partial_T \mathcal{P}_J|$  l'emporte sur  $|\partial_T \mathcal{P}_N + \partial_T \mathcal{P}_\theta|$  : c'est l'emballement résistif.
2. Une seconde phase de stabilisation qui signifie que  $|\partial_T \mathcal{P}_N + \partial_T \mathcal{P}_\theta|$  redevient supérieur à  $|\partial_T \mathcal{P}_J|$ . La comparaison de l'amplitude des courbes vertes et bleues en régime permanent à  $E_{th} + \delta$  sur les figures 3.13, 3.14 et 3.15 montre que ce retour à l'équilibre est d'avantage dû à l'effet Nottingham – devenu fortement refroidissant – qu'à l'évacuation thermique. Par ailleurs, ce constat est renforcé par la comparaison des courbes de la figure 3.19, qui montre qu'en l'absence d'effet Nottingham refroidissant,  $|\partial_T \mathcal{P}_\theta|$  ne parvient pas à compenser seul  $|\partial_T \mathcal{P}_J|$  et l'emballement se poursuit au delà des températures de fusion de l'émetteur.

La nécessité d'atteindre un effet Nottingham fortement refroidissant sur toute la surface d'émission explique le changement radical de la distribution en température entre les deux points d'équilibre, avec l'apparition du cœur chaud (cf. 3.11). À mesure que la surface émissive évacue de plus en plus de calories à  $E_{th} + \delta$ , le cœur chaud avance vers une position d'équilibre plus loin du sommet. Notons alors que la position d'équilibre le long de l'axe  $z$  est aussi nécessairement influencée par la variation de la section transverse de l'émetteur – *i.e.* section dans le plan  $(x, y)$ . Essentiellement, si la section de l'émetteur s'accroît vers la base, la densité de chauffage résistif à la position correspondante s'effondre rapidement. Le cœur chaud atteint donc plus rapidement une position stable, ce qui aura tendance à réduire le saut en température. Ces effets géométriques sont en fait dissimulés dans les termes globaux  $\partial_T \mathcal{P}_J$ ,  $\partial_T \mathcal{P}_N$  et  $\partial_T \mathcal{P}_\theta$  (et difficilement accessibles).

Cette dernière remarque illustre les limites du raisonnement analytique 0D que l'on vient de développer pour saisir précisément toute la physique qui mène à la bistabilité observée. Tenter de pousser plus loin le développement en explicitant les grandeurs  $\mathcal{P}_J$ ,  $\mathcal{P}_N$  et  $\mathcal{P}_\theta$  en fonction de  $E$  et  $T$  nécessiterait de réduire en amont le problème à une situation simplifiée 1D, voire 0D, mais constituerait tout de même une perspective pertinente pour poursuivre l'analyse de la stabilité thermique des émetteurs à effet de champ. En particulier, une analyse de ce type pourrait permettre de comprendre la contribution contre-intuitive de la conductivité thermique à l'emballement résistif.

Enfin, cloturons cette section en mentionnant les résultats expérimentaux de Dyke *et al.* [12] sur la stabilité de l'émission de champ d'une pointe micrométrique en tungstène. L'article rapporte un saut reproductible en courant qui apparaît à 1 ou 2% en dessous de la tension de claquage (tension au delà de laquelle un arc électrique suit l'explosion thermique de l'émetteur). L'étude indique aussi que des températures supérieures à 2100 K sont requises pour observer cet effet. Le saut en densité de courant est suffisamment important pour être visible sur le tracé de Fowler Nordheim de la caractéristique courant-tension (*in ref.* figure 3, mesures E et F).

On ne peut pas certifier *a posteriori* que ce saut soit bien relié à une bistabilité d'inversion Nottingham. Toutefois, cela suggère la possibilité de chercher expérimentalement des signatures de cette bistabilité par le biais d'une analyse de la caractéristique courant-tension d'émetteurs micrométriques uniques. Ce type de travaux expérimentaux aiderait à mieux comprendre l'implication du refroidissement Nottingham dans la stabilisation du chauffage résistif, ce qui pourrait à terme contribuer à améliorer la stabilité thermique des sources d'électrons à effet de champ et améliorer la tenue haute tension sous vide des électrodes (le tungstène, le tantale et le molybdène étant des métaux régulièrement utilisés pour la fabrication d'électrodes dans les machines sous ultra haute tension [3, 13, 14]).

### 3.3 Conclusion

Au cours de la première section nous nous sommes concentrés sur la résolution de l'autoéchauffement d'hémiellipses de facteur d'aspect  $f$  allant de 1 à 10. Ces formes géométriques idéalisées correspondent à des facteurs de renforcement de champ allant de 3 à 50, modélisant ainsi les caractéristiques typiques d'un large spectre d'émetteurs ou d'aspérités micrométriques.

Une première série de résultats a permis de détailler l'influence de la taille des aspérités sur les phénomènes thermiques. Les pointes plus petites présentant un temps de diffusion plus court, elles sont moins sujettes à un fort autoéchauffement, raison pour laquelle leur tension de claquage est plus élevée d'environ une vingtaine de pourcents (ce qui est significatif quand on rappelle la variation fortement non linéaire du courant avec le champ électrique).

Par ailleurs, cette étude a permis de qualifier les différents régimes de contributions de l'effet Joule et Nottingham à l'autoéchauffement, dont la compétition dépend grandement du rapport surface sur volume. Par ailleurs, si le chauffage résistif est accentué par un faible ratio  $S/V$ , c'est aussi lui qui domine l'autoéchauffement à l'approche de la tension de claquage. C'est en revanche l'effet Nottingham seul qui contribue à l'autoéchauffement au début du régime d'émission de champ thermoassistée.

L'étude de plusieurs facteurs d'aspect  $f$  à hauteur de pointe  $H$  constante a aussi permis de mettre

en évidence une contribution thermique accentuée pour les émetteurs moins profilés. En effet, bien que la tension nécessaire à l'émission de ces pointes soit plus élevée, le courant est en fait extrait à un champ local  $F$  plus faible, ce qui favorise la contribution de la température. À l'approche de la tension de claquage, les distributions en température de ces émetteurs plus larges révèlent une augmentation non négligeable de la température au voisinage de leur base. Ce résultat pourrait alors être à l'origine d'un couplage thermique entre émetteurs lorsque plusieurs sites émissifs se retrouvent à proximité. Ce phénomène sera quantifié en détail dans le prochain chapitre.

La seconde section était dédiée au cas particulier des métaux réfractaires, dont le point de fusion élevé permet l'exploration de l'autoéchauffement à des températures bien au-delà la température d'inversion Nottingham. Nos résultats ont alors révélé l'existence théorique d'une bistabilité thermique reliée au développement d'un emballement du chauffage résistif finalement compensé par l'inversion du flux de chaleur Nottingham à plus haute température.

Il était connu que le passage à un effet Nottingham refroidissant causait l'enfoncement de la position du maximum de température dans le volume de l'émetteur, et par voie de conséquence la formation d'un domaine de haute température – un "cœur chaud" – en dessous de la surface d'émission. Notre analyse détaillée de l'évolution de l'autoéchauffement a montré que la transition vers ce type d'équilibre en régime permanent pouvait être discontinue. L'écart thermique au niveau de la discontinuité correspond au surplus de chaleur apporté par l'emballement résistif avant sa stabilisation par l'effet Nottingham, rendant impossible d'atteindre toute une gamme de situations thermiques en régime permanent.

L'enclenchement de l'instabilité à l'origine de cette discontinuité (et l'amplitude de celle-ci) a été relié à la compétition entre les dérivées avec la température des termes globaux de chauffage. Ces grandeurs moyennées sur l'ensemble de l'émetteur cachent en revanche les effets de la géométrie et des propriétés matériaux de l'émetteur sur la bistabilité. Pour capter ces effets, le recours à des études paramétriques numériques est nécessaire. En échantillonnant quelques géométries bien choisies, nos résultats indiquent qu'un facteur d'aspect plus faible accroît l'instabilité, de même qu'un rapport surface sur volume plus faible dont bénéficie le chauffage résistif volumique par rapport à la densité surfacique de flux de chaleur Nottingham. En jouant sur les propriétés matériaux, nous avons aussi mis en évidence qu'une meilleure conductivité thermique augmentait l'instabilité de l'autoéchauffement de l'émetteur à l'approche du champ seuil. Réduire le problème à une version 0D ou 1D pour pouvoir expliciter analytiquement les dérivées locales du chauffage avec la température pourrait permettre de comprendre cette relation, contre-intuitive au premier abord. Cette direction constitue par ailleurs une bonne perspective pour approfondir la compréhension de la bistabilité d'inversion Nottingham et de ses modalités.

Enfin, sur une note plus générale, la bistabilité d'inversion Nottingham met en lumière comment un système d'équations bien connues peut mener à des comportements inattendus lorsqu'elles sont couplées sur des géométries réalistes. Cette bistabilité est à sa manière un exemple éloquent de ces dynamiques complexes qui disparaissent quand la physique est sur simplifiée.

## Références du chapitre 3

« *Learning from others is second nature to humans : we do it more readily and precisely than any other animal.* »

– Franz de Waal  
(The Ape and the Sushi Master, 2001)

- [1] Darius MOFAKHAMI et al. « Unveiling the Nottingham Inversion Instability during the Thermo-Field Emission from Refractory Metal Micro-Protrusions ». In : *Scientific Reports* 11.1 (juill. 2021), p. 15182. ISSN : 2045-2322. DOI : [10.1038/s41598-021-94443-7](https://doi.org/10.1038/s41598-021-94443-7) (cf. p. 73, 98).

- [2] G. P. BEUKEMA. « Electrical Breakdown Properties of Stainless Steel and Titanium Electrodes in Ultra-High Vacuum ». In : *Physica B+C* 103.2 (fév. 1981), p. 397-411. ISSN : 0378-4363. DOI : [10.1016/0378-4363\(81\)90147-9](https://doi.org/10.1016/0378-4363(81)90147-9) (cf. p. 73).
- [3] A. DESCOEUDRES et al. « Dc Breakdown Conditioning and Breakdown Rate of Metals and Metallic Alloys under Ultrahigh Vacuum ». In : *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 12.3 (mars 2009), p. 032001. DOI : [10.1103/PhysRevSTAB.12.032001](https://doi.org/10.1103/PhysRevSTAB.12.032001) (cf. p. 73, 101).
- [4] T. SU, C.L. LEE et J.C.-M. HUANG. « Electrical and Thermal Modeling of a Gated Field Emission Triode ». In : *Proceedings of IEEE International Electron Devices Meeting*. Washington, DC, USA : IEEE, 1993, p. 765-768. ISBN : 978-0-7803-1450-4. DOI : [10.1109/IEDM.1993.347201](https://doi.org/10.1109/IEDM.1993.347201) (cf. p. 81).
- [5] M. G. ANCONA. « Thermomechanical Analysis of Failure of Metal Field Emitters ». In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 13.6 (nov. 1995), p. 2206. ISSN : 0734211X. DOI : [10.1116/1.588105](https://doi.org/10.1116/1.588105) (cf. p. 81).
- [6] G. N. FURSEY. « Field Emission and Vacuum Breakdown ». In : *IEEE Transactions on Electrical Insulation* EI-20.4 (août 1985), p. 659-670. ISSN : 0018-9367. DOI : [10.1109/TEI.1985.348883](https://doi.org/10.1109/TEI.1985.348883) (cf. p. 86).
- [7] G. N. FURSEY, D. V. GLAZANOV et S. A. POLEZHAEV. « Field emission from nanometer protuberances at high current density ». In : *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation* 2.2 (avr. 1995). Conference Name : IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, p. 281-287. ISSN : 1558-4135. DOI : [10.1109/94.388253](https://doi.org/10.1109/94.388253) (cf. p. 86).
- [8] George FURSEY. *Field Emission in Vacuum Microelectronics*. Microdevices. New York : Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2005. ISBN : 978-0-306-47450-7 (cf. p. 86).
- [9] A. L. REIMANN. « The Temperature Variation of the Work Function of Clean and of Thoriated Tungsten ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences* 163.915 (déc. 1937), p. 499-510. ISSN : 0080-4630, 2053-9169. DOI : [10.1098/rspa.1937.0241](https://doi.org/10.1098/rspa.1937.0241) (cf. p. 94).
- [10] L. W. SWANSON et G. A. SCHWIND. « Chapter 2 A Review of the Cold-Field Electron Cathode ». en. In : *Advances in Imaging and Electron Physics*. T. 159. Advances in Imaging and Electron Physics. Elsevier, jan. 2009, p. 63-100. DOI : [10.1016/S1076-5670\(09\)59002-7](https://doi.org/10.1016/S1076-5670(09)59002-7). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1076567009590027> (visité le 05/12/2020) (cf. p. 94).
- [11] L. W. SWANSON et L. C. CROUSER. « Total-Energy Distribution of Field-Emitted Electrons and Single-Plane Work Functions for Tungsten ». In : *Physical Review* 163.3 (nov. 1967), p. 622-641. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.163.622](https://doi.org/10.1103/PhysRev.163.622) (cf. p. 94).
- [12] W. P. DYKE et al. « The Field Emission Initiated Vacuum Arc. I. Experiments on Arc Initiation ». In : *Physical Review* 91.5 (sept. 1953), p. 1043-1054. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.91.1043](https://doi.org/10.1103/PhysRev.91.1043) (cf. p. 101).
- [13] Claude ACHARD et al. « A Demonstration of High-Gradient Acceleration ». In : *CERN Document Server*. CERN-AB-2003-048-RF. Mai 2003 (cf. p. 101).
- [14] C. Z. ANTOINE, F. PEAUGER et F. LE PIMPEC. « Erratum to : Electromigration occurrences and its effects on metallic surfaces submitted to high electromagnetic field : A novel approach to breakdown in accelerators ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 670 (avr. 2012), p. 79-94. ISSN : 0168-9002. DOI : [10.1016/j.nima.2012.01.027](https://doi.org/10.1016/j.nima.2012.01.027). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900212000678> (visité le 27/07/2018) (cf. p. 101).





## Chapitre 4

# Assemblées d'émetteurs proches : Ecrantage électrostatique, espacement optimal et couplage thermique

« [...] *we can make successive approximations to the truth, in which each new stage results from an improvement, not a rejection, of what has gone before.* »

---

Bertrand Russell  
(History of Western Philosophy – 1945)

### Sommaire

---

<b>4.1 Interaction électrostatique entre émetteurs à proximité</b> . . . . .	<b>107</b>
4.1.1 Loi d'écrantage électrostatique avec la distance . . . . .	107
4.1.2 Recherche de l'espacement optimal dans les réseaux . . . . .	108
4.1.3 Implications de l'auto échauffement dans la recherche d'un espacement optimal	111
<b>4.2 Autoéchauffement en 3D et couplage thermique</b> . . . . .	<b>114</b>
4.2.1 Phénoménologie du couplage thermique . . . . .	114
4.2.2 Analyse paramétrique du couplage thermique . . . . .	116
4.2.3 Amplitude du couplage thermique en conditions expérimentales . . . . .	120
<b>4.3 Conclusion</b> . . . . .	<b>122</b>

---

Comme détaillé dans le chapitre introductif, les réseaux d'émetteurs à effet de champ (FEA pour *Field Emitter Arrays* en anglais) ont montré de très bonnes performances dans certains domaines spécifiques. La simplification et la réduction des coûts de leur production permis par l'amélioration des techniques de gravure aux échelles micro/nanométrique a ouvert la voie à une intensification de leur utilisation dans un nombre croissant d'applications.

En revanche, l'amélioration de ces techniques a aussi grandement accru le champ des possibilités en termes de géométrie, d'échelle, de composition et de disposition des émetteurs. Ainsi, bien que l'on puisse fabriquer plus facilement une grande diversité de sources type FEA, leur développement donne lieu à des projets longs et ambitieux qui demande plusieurs années pour aboutir – comme on le verra pour un cas spécifique dans le dernier chapitre de cette thèse. La modélisation apparaît alors comme un outil efficace pour explorer l'espace des possibles, cibler les paramètres clés et aider à optimiser un type de source donnée.

En particulier, la prise en compte de l'autoéchauffement permet d'évaluer le champ de préclaquage et d'obtenir le courant maximal que l'on peut extraire d'un émetteur donné avant sa destruction thermique. Il devient ainsi possible de déterminer la configuration optimale qui maximise le

---

courant émis sur toute la gamme d'émission, de l'allumage (apparition d'un courant mesurable) jusqu'au champ de préclaquage. Si les valeurs obtenues ne sont pas nécessairement directement transposables aux expériences, elles permettront tout de même de dégager les tendances générales qui pourront ensuite aiguiller les efforts expérimentaux autrement plus coûteux.

Jusqu'ici, nous avons analysé des résultats de simulations d'émetteurs isolés. Dans les situations réelles, comme on peut l'observer pour des sources d'électrons ou dans le cas d'aspérités provenant de la rugosité naturelle d'une surface, les émetteurs sont généralement groupés (*cf.* Fig. 1.7 et 1.8). Dans ce cas, bien qu'on puisse toujours en première approximation modéliser les émetteurs par des géométries simplifiées axisymétriques, la géométrie dans son ensemble n'est plus symétrique. Une modélisation 3D est requise pour rendre compte de la proximité des émetteurs et de leurs interactions. La difficulté réside alors dans la lourdeur du calcul induit par la résolution temporelle des équations couplées de la chaleur et du courant en 3D (très grands nombres d'éléments de maille). Pour conserver des temps de calcul raisonnables, de l'ordre de l'heure pour une station de travail actuelle, nous nous limitons dans ce chapitre à deux configurations idéales :

- Une configuration de deux émetteurs identiques séparés d'une distance  $d$  (Fig. 4.1a). Le plan de symétrie centrale permet de diviser par deux le domaine de simulation effectif.
- Un réseau infini d'émetteurs identiques avec un pas  $d$  (Fig. 4.1b). La maille du réseau est un carré  $d \times d$ . La configuration est cependant simulée à partir d'un carré  $d/2 \times d/2$  incluant un quart d'émetteur, permettant de simuler le réseau infini en utilisant des conditions aux limites miroir sur les faces latérales.

La première section s'intéresse à l'écrantage électrostatique dans ces deux configurations. La perte de champ induite par la proximité des émetteurs pose la question de l'optimisation de l'espacement dans les sources de type FEA. En effet, si la densification des émetteurs doit augmenter le courant émis par unité de surface, l'écrantage électrostatique peut drastiquement réduire le renforcement de champ jusqu'à éteindre l'émission pour un champ trop faible. Le compromis entre ces deux effets mène à l'existence d'un optimal que l'on peut déterminer par la modélisation. Par ailleurs, pour une émission intense en régime thermochamp l'autoéchauffement des émetteurs peut induire une augmentation locale de la température à leur base. Dans le cas d'une configuration dense, cette augmentation de la température peut amplifier l'échauffement des émetteurs et ainsi contribuer pour une partie du courant émis. C'est ce phénomène de couplage thermique que nous étudions en deuxième section.

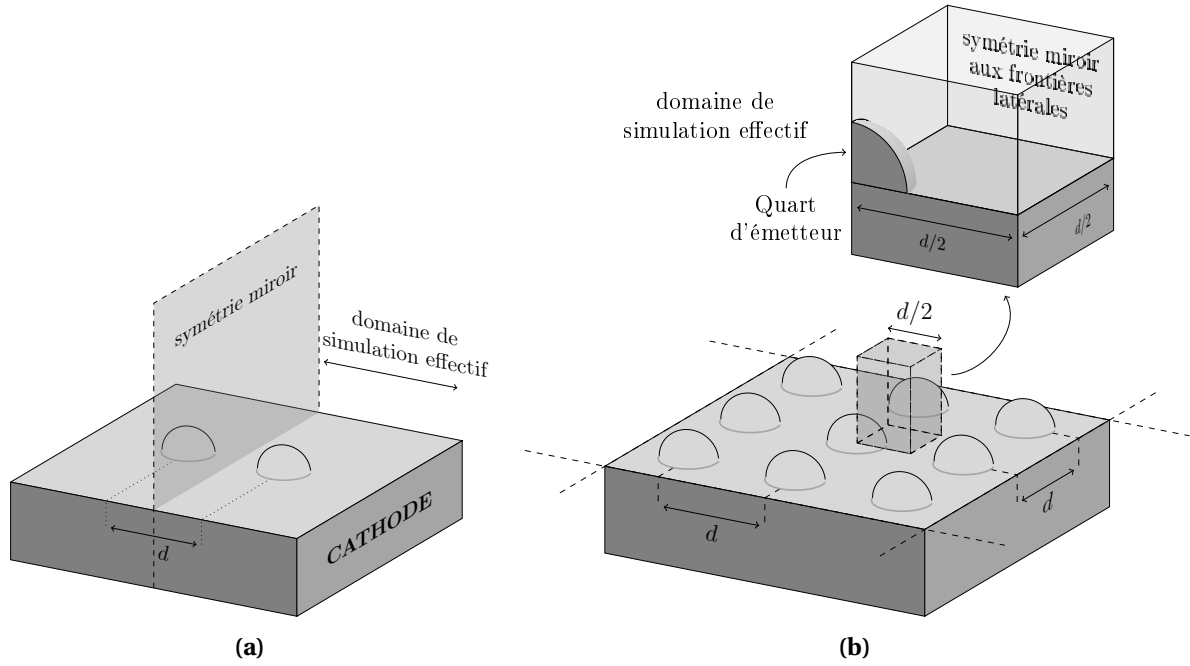


FIGURE 4.1 – Schéma des deux arrangements 3D considéré dans ce chapitre (exemple avec  $f = 1$ ). (a) : Deux émetteurs identiques séparés par une distance  $d$ . (b) : Réseau infini d'émetteurs identiques avec une maille carrée d'espacement  $d$ . Les schémas ne sont pas à l'échelle.

## 4.1 Interaction électrostatique entre émetteurs à proximité

### 4.1.1 Loi d'écrantage électrostatique avec la distance

Dans des configurations 3D, la proximité entre les émetteurs induit une dépolarisation mutuelle [1] qui réduit l'amplitude du champ électrique en leur sommet. Ce phénomène d'écrantage électrostatique, qui est théoriquement bien compris, a même pu être expérimentalement mesuré aux échelles micrométriques [2]. On peut le voir de la manière suivante : chaque émetteur perturbe la distribution des équipotentielles autour de ses proches voisins, ce qui résulte en un plus faible renforcement de champ par rapport aux cas d'émetteurs isolés (cf. Fig. 4.2).

Nous quantifions ici cet effet par la comparaison de  $\beta(d)$  – le renforcement de champ au sommet réduit lorsque l'émetteur est en interaction – avec le renforcement de champ au sommet de l'émetteur isolé  $\beta_\infty = \beta(d \rightarrow \infty)$ . Du fait de la décroissance exponentielle du courant émis avec les champs électriques plus faibles, même un faible écrantage peut induire une perte de courant notable. La gestion de la proximité représente ainsi une préoccupation centrale pour les sources d'électrons basées sur une multitude d'émetteurs en réseau. C'est la raison pour laquelle de nombreux travaux ont cherché à décrire la variation de l'écrantage en fonction de l'espacement des émetteurs dans différentes configurations. Une première formule a été introduite par Bonard *et al.* [3] (in ref. §7) dans l'optique de reproduire correctement un ensemble de résultats expérimentaux obtenus pour des nanotubes de carbone :

$$\beta(d) = \beta_\infty \left[ 1 - \exp\left(-a \frac{d}{H}\right) \right] \quad (4.1)$$

où  $H$  est la hauteur de l'émetteur, et  $a$  un paramètre libre (égal à 1.16 pour les résultats de Bonard *et al.*). En appliquant cette formule aux résultats d'une simulation électrostatique d'un réseau carré infini d'émetteurs de type sphère sur cylindre, Jo *et al.* [4] (in ref. Eq. (2)) ont trouvé  $a = 2.3172$ . Cette formule a ensuite été améliorée par Harris *et al.* [5] à l'aide d'un développement numérique basé sur des distributions linéiques de charges :

$$\beta(d) = \beta_\infty \left[ 1 - \exp\left(-a \left(\frac{d}{H}\right)^c\right) \right] \quad (4.2)$$

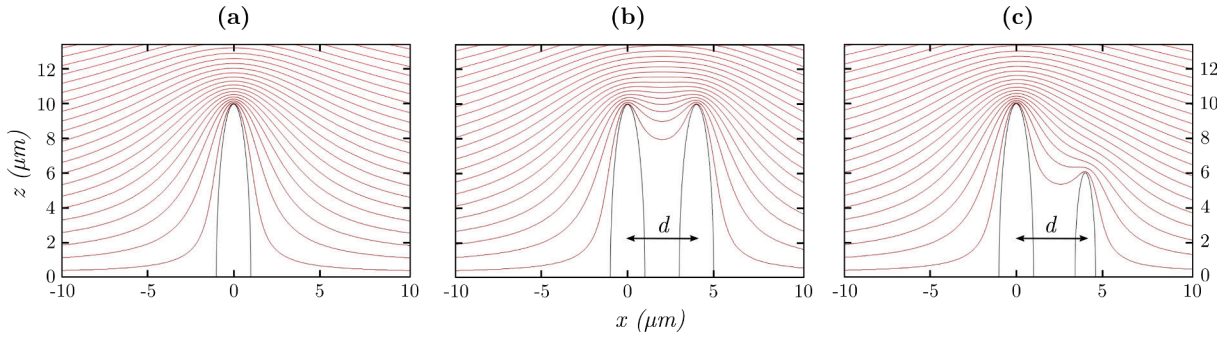


FIGURE 4.2 – Phénoménologie de l'écrantage : distributions des lignes équipotentielles entre deux électrodes planes en présence d'émetteurs pour différent cas. Les graphiques sont des plans de coupe 2D le long de l'axe  $x$  de simulations 3D. La compression des équipotentielles au sommet des émetteurs mène à un renforcement du champ électrique tandis que leur écartement aux alentours de la base donne un champ réduit. **(a)** : Un émetteur isolé. **(b)** : Deux émetteurs identiques séparés d'une distance  $d$ . Les équipotentielles sont légèrement moins comprimées. **(c)** : Deux émetteurs de taille différente séparés d'une distance  $d$ . Les équipotentielles restent très comprimées au sommet du grand émetteur, mais le sont beaucoup moins au sommet du petit émetteur.

L'introduction de l'exposant  $c$  a pour but de conserver un fit optimal dans d'autres arrangements d'émetteurs, comme un réseau de maille triangulaire ( $c = 1.09$ ). Pour un réseau carré, les deux formules sont équivalentes, puisque le meilleur fit est obtenu pour  $c = 1$ .

En parallèle, en supposant que le champ au sommet d'un émetteur pouvait être correctement reproduit en assimilant ce dernier à une sphère flottante à la même hauteur et au même potentiel (potentiel de la cathode) Dall'Agnol *et al.* [1] ont obtenu la formule suivante :

$$\beta(d) = \beta_{\infty} \left( 1 - \frac{A}{B + \left(\frac{d}{H}\right)^3} \right) \quad (4.3)$$

avec les paramètres de fit  $A$  et  $B$ . La figure 4.3 évalue la performance de ces formules face aux résultats numériques obtenus *via* COMSOL dans le cas d'un réseau infini d'émetteurs hémisphériques identiques. Les courbes du graphique 4.3a se superposent bien pour  $f = 1$ , avec un écart inférieur au pourcent. Dans le cas de  $f = 10$  cependant (graphique 4.3b) on note une erreur plus grande, de l'ordre de plusieurs %. L'erreur est encore plus marquée pour la formule de Dall'agnol et s'accroît aux très faibles distances. Cela pourrait s'expliquer par le fait qu'un modèle de sphères flottantes ne permet pas de bien modéliser le champ au sommet d'hémisphères fortement profilées, l'évolution de la courbure géométrique étant nettement différente entre les deux cas.

#### 4.1.2 Recherche de l'espace optimal dans les réseaux

Dans la continuité de ces travaux, un grand nombre d'études se sont penchées sur le problème de l'espace optimal dans les réseaux d'émetteur à effet de champ (FEA) pour optimiser le courant émis par unité de surface de la cathode [6, 7, 8].

Basé sur la formule 4.2 de l'écrantage en réseau, Harris *et al.* ont développé un raisonnement analytique pour prédire l'évolution de l'espace optimal avec le champ [5]. Ils utilisent la formulation de Jensen (*cf.* Eq. E.10) de l'équation de Murphy et Good pour la densité de courant,

$$J(F) = \frac{C_1 F^{2-\nu}}{\varphi t^2(y)} (C_3 \varphi^2)^{\nu} \exp\left(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F}\right) \exp\left(\frac{C_2}{C_3 \sqrt{\varphi}}\right) \quad (4.4)$$

– où  $C_2$ ,  $C_3$  et  $\nu$  sont les constantes définies au chapitre 2 (*cf.* Eq. E.1) – et les explorations théoriques de Jensen et Forbes sur l'approximation analytique de la surface d'émission [9]. Pour un émetteur isolé,

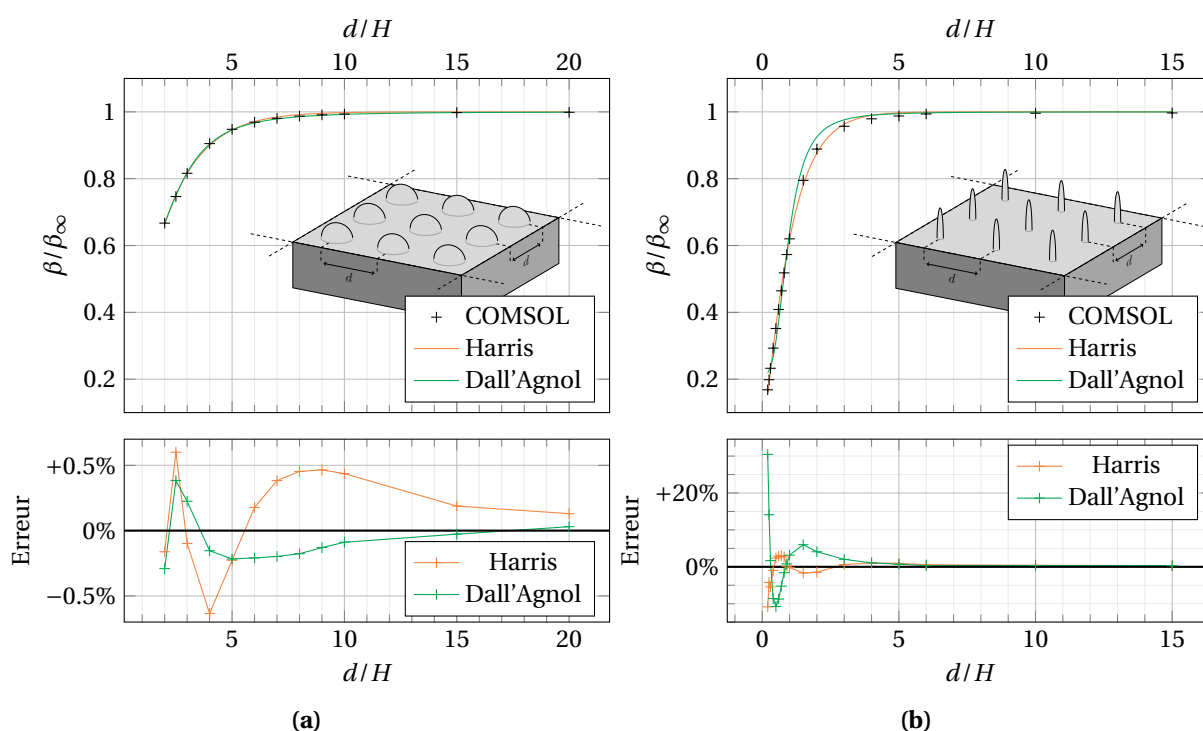


FIGURE 4.3 – Variation de l'écrantage avec l'espacement  $d$  d'un réseau infini d'émetteurs. Les données de COMSOL sont comparées aux formules 4.2 (Harris) et 4.3 (Dall'Agnol). Le renforcement de champ effectif d'un émetteur dans le réseau est noté  $\beta$  et est comparé au renforcement de champ d'un émetteur isolé  $\beta_\infty$ . **(a)** Facteur d'aspect  $f = 1$ , paramètres de fit :  $a = 0.52$ ,  $c = 1.1$ ,  $A = 7.6$  et  $B = 15$ . **(b)** : Facteur d'aspect  $f = 10$ , paramètres de fit :  $a = 0.96$ ,  $c = 1.1$ ,  $A = 0.66$  et  $B = 0.84$ . Les graphiques inférieurs renseignent l'écart absolu en % entre les formules et le résultat numérique.

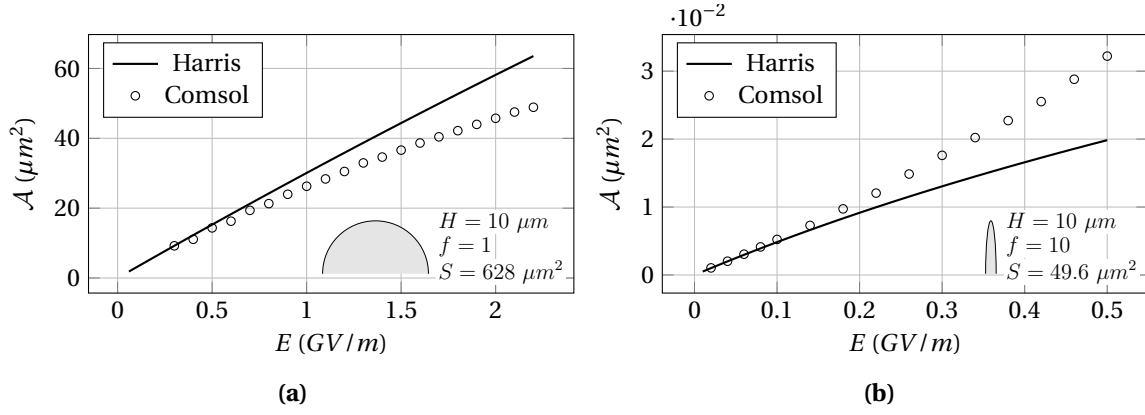


FIGURE 4.4 – Écart entre le calcul analytique de la surface d'émission équivalente  $\mathcal{A}$  et son évaluation numérique pour **(a)** :  $f = 1$  et **(b)** :  $f = 10$ .

cette surface d'émission équivalente (*notional emission surface* en anglais, cf. [9] Eq. 42) est définie par :

$$\mathcal{A}(F) := \frac{1}{J(F_a)} \int_S J(F) dS = \frac{2\pi}{J(F_a)} \int r \cdot J(r) dr \quad (4.5)$$

où  $F_a = \beta E$  est le champ au sommet de l'émetteur, et  $F = \beta(r)E$  la distribution de champ local à sa surface. Dans le cas d'un émetteur isolé, on peut donner une approximation analytique de la variation de  $F(r)$  au voisinage du sommet par des arguments d'électrostatique [10] de sorte à exprimer à l'ordre principal la surface d'émission d'une hémelliipse par [9] (*in ref.* Eq. 44)<sup>1</sup> :

$$\mathcal{A}(F) = \frac{2\pi r_C^2}{\frac{C_2 \varphi^{3/2}}{\beta(d)E} - \nu + 1} \quad (4.6)$$

où  $r_C$  vaut ici  $H/f^2$ , le rayon de courbure au sommet d'une hémelliipse. La figure 4.4 montre l'écart entre ce résultat analytique et l'évaluation numérique de la surface d'émission équivalente (Eq. 4.5). On voit que l'ordre de grandeur est bon, mais l'écart se creuse nettement pour les champs forts. Cela s'explique par le fait qu'à mesure que le champ augmente, les régions périphériques contribuent de plus en plus au courant, ces régions mêmes où l'amplitude du champ diffère de plus en plus de l'approximation obtenue par des arguments simplificateurs d'électrostatique.

Avec ces deux formules, l'article de Harris aboutit à une densité de courant macroscopique  $\mathcal{J}$  selon l'expression suivante :

$$\mathcal{J}(d, E) := \frac{\text{courant émis}}{\text{maille du réseau}} = \frac{I}{d^2} = \frac{1}{d^2} \times \mathcal{A}(F) \times J(F) \quad (4.7)$$

Précisons que  $\mathcal{J}$  est à distinguer de la densité de courant localement émise  $J$ .

La distance optimale  $d_{\text{opt}}$  qui maximise  $\mathcal{J}$  est par définition la solution de l'équation  $d\mathcal{J}/dd = 0$ . En utilisant la formule 4.2 pour  $\beta(d)$ , on obtient une équation transcendante sur  $d_{\text{opt}}$ , soluble numériquement :

$$\frac{d\mathcal{J}}{dd} = 0 \Leftrightarrow \left. \frac{d\beta}{dd} \right|_{d_{\text{opt}}} = \frac{2\beta(d_{\text{opt}})}{d_{\text{opt}}} \left[ \left( \frac{\mathcal{A}(F)}{2\pi r_T^2} + 1 \right) \frac{C_2 \varphi^{3/2}}{\beta(d_{\text{opt}})E} - \nu + 2 \right]^{-1} \quad (4.8)$$

Il est alors possible de déterminer la variation de  $d_{\text{opt}}$  avec le champ appliqué  $E$ , et d'étudier l'influence de la géométrie du réseau *via* les valeurs de  $\beta$ , de  $a$  et  $c$  (cf. Eq. 4.2) ou des paramètres matériaux *via* celles de  $\varphi$  et  $\nu$ .

La figure 4.5 montre justement l'évolution avec le champ de l'espacement optimal pour  $f = 1$  ( $a = 0.55$ ) et  $f = 10$  ( $a = 0.96$ ). Par ailleurs, les deux graphiques comparent les valeurs prédites par le

1. Pour une géométrie sphère sur cylindre, il faut changer le  $-\nu + 1$  en  $-\nu + 4$  dans le dénominateur.

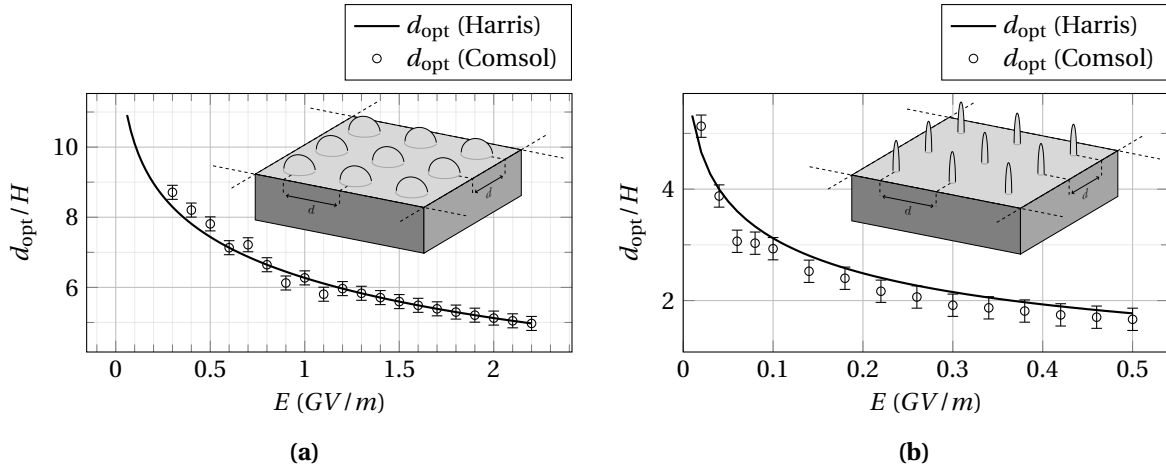


FIGURE 4.5 – Variation de l'espace optimal avec l'amplitude du champ appliqué. Comparaison entre les résultats obtenus par le développement semi-analytique de Harris et al, et par la résolution électrostatique de notre modèle sous comsol. (a) :  $f = 1$ . (b) :  $f = 10$ . Pour rappel,  $H = 10\mu m$  dans les deux cas.

développement analytique de Harris *et al.* (ligne pleine) avec celles obtenues par résolution de notre modèle sous Comsol de la manière suivante : pour chaque valeur de champ, on calcule la densité de courant macroscopique sur toute une gamme de distance (une simulation électrostatique par valeur d'espace). La valeur maximale de densité de courant nous permet alors de déterminer la distance optimale. En revanche, l'échantillonnage sur  $d$  entre deux simulations donne lieu à une incertitude sur  $d_{opt}$ . Pour ne pas sous-estimer cette incertitude, on la prend directement égale au pas entre deux valeurs d'espace, qui vaut dans ce cas précis  $0.2H = 2\mu m$ .

Avec cette incertitude en tête, on voit que les deux méthodes prédisent une tendance tout à fait similaire : En accord avec les quelques autres études sur le sujet [11, 12, 13], la distance optimale diminue à mesure que le champ appliqué augmente. En fait, ce résultat est assez intuitif puisque sans limite sur le champ, il apparaît rapidement évident qu'une surface plane ( $d \rightarrow 0$ ) directement soumise à plusieurs gigavolts par mètre devrait présenter la meilleure densité de courant macroscopique.

Pour pouvoir imposer une limite sur le champ, certaines études électrostatiques se basent sur la mesure expérimentale du courant maximal pouvant être émis par un émetteur avant sa destruction thermique (voir par exemple [14], p.4). Cependant, cette valeur expérimentale n'est pas nécessairement cohérente avec la modélisation d'émetteurs idéaux. Par ailleurs, aucune étude à la connaissance de l'auteur ne s'est servie d'une telle valeur limite pour remettre en perspective l'optimum prédit par simple résolution électrostatique. Sur ce dernier point, la modélisation de l'échauffement des émetteurs apporte un nouvel éclairage.

### 4.1.3 Implications de l'auto échauffement dans la recherche d'un espace optimal

Modéliser l'échauffement des émetteurs est un moyen raisonnable d'évaluer *de manière auto suffisante* le champ de préclaquage d'une géométrie simplifiée. Les résultats de simulation en deviennent plus facilement généralisables et peuvent fournir une intuition pour mieux comprendre des résultats expérimentaux mesurés par la suite.

Considérons le cas précédent d'un réseau carré infini d'émetteurs identiques avec  $f = 10$  (cf. Fig. 4.6a). Pour un champ donné, on peut déterminer la densité de courant macroscopique  $\mathcal{J}$  délivrée pour toute une gamme d'espace du réseau. En faisant ainsi au champ de préclaquage d'un émetteur isolé,  $E = 0.16$  GV/m, on voit clairement l'apparition d'un maximum de  $\mathcal{J}$  (Fig. 4.6b). Il est alors intéressant de noter que la distance optimale correspondante est légèrement changée selon que l'on prend en compte ou non la contribution thermique au courant : dans le cadre de simulations purement électrostatiques (courbe noire), on trouve  $d_{opt}(300 K) = 24\mu m = 2.4H$ , tandis qu'avec l'autoéchauffement (courbe rouge) l'optimum se retrouve décalé à  $d_{opt}(T) = 26\mu m = 2.6H$  avec une



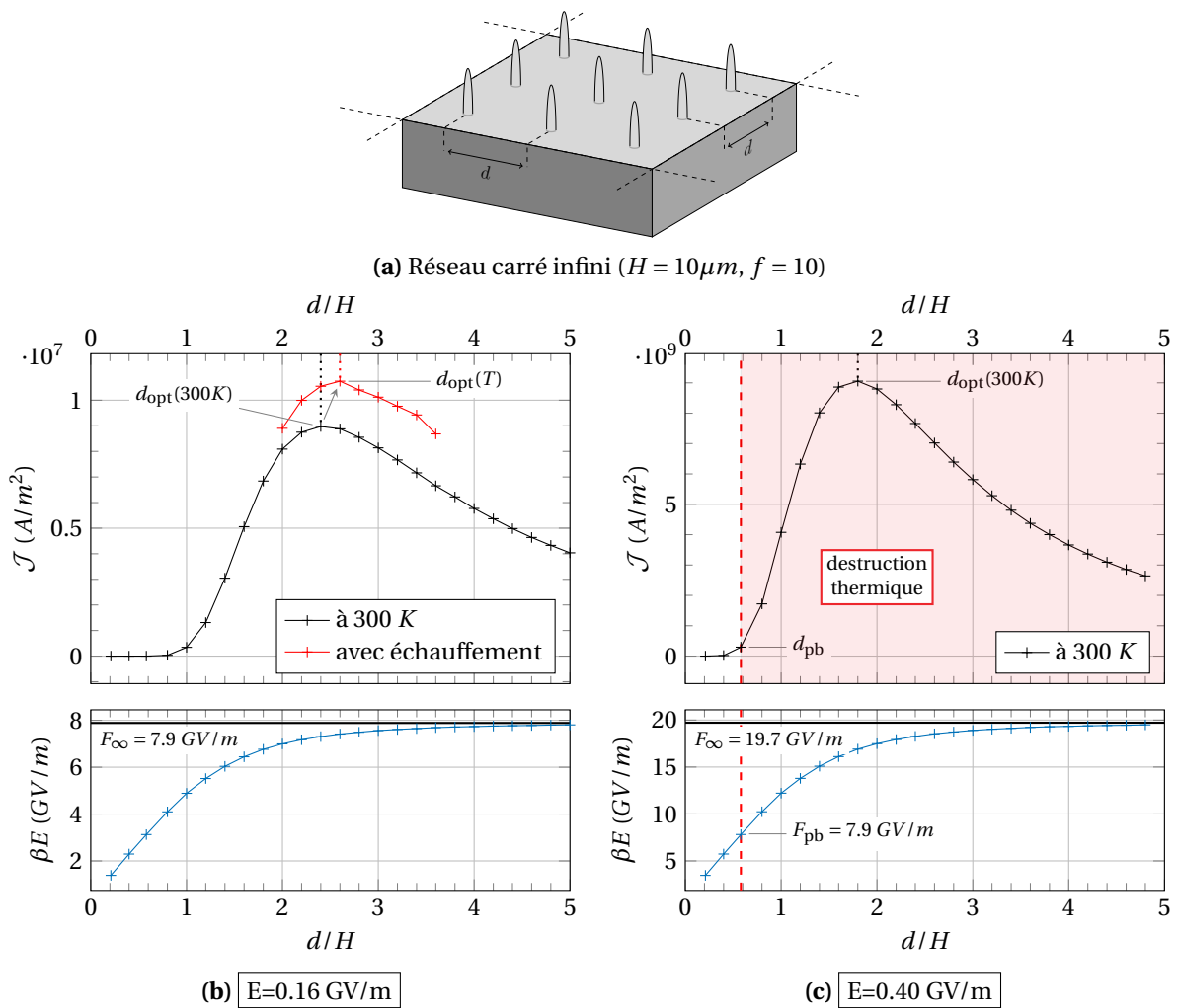


FIGURE 4.6 – Graphiques supérieurs : variation du courant par émetteur rapportée à la surface d'une maille du réseau ( $\mathcal{J} = I/d^2$ ) en fonction de l'espacement  $d$ . Graphiques inférieurs : variation du champ  $F_a = \beta E$  au sommet d'un émetteur avec l'espacement du réseau  $d$ . L'axe  $x$  est identique pour les deux graphiques.

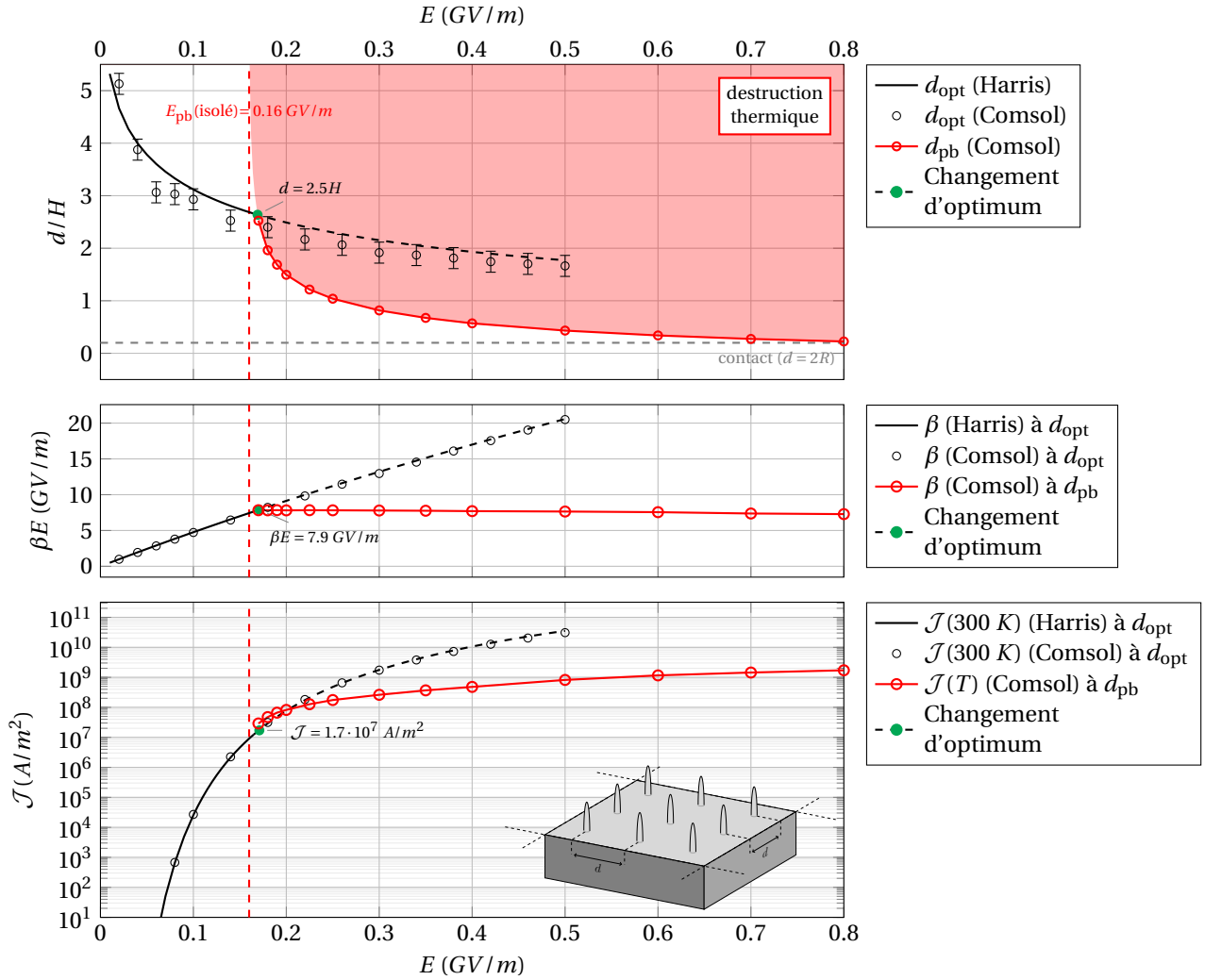


FIGURE 4.7 – Le premier graphique donne la variation de la distance optimale  $d_{\text{opt}}$  et de la distance de préclaquage en fonction du champ appliqué  $E$ . Le graphique met en évidence la transition de l’optimum de  $d_{\text{opt}}$  vers  $d_{\text{pb}}$  (point vert) une fois le champ de préclaquage d’un émetteur isolé dépassé (ligne en tirets rouge). Le second graphique montre la variation du champ local au sommet de l’émetteur  $F_a = \beta E$  à chaque valeur de  $d_{\text{opt}}$  et  $d_{\text{pb}}$ . Le troisième graphique indique la densité de courant macroscopique  $\mathcal{J} = I/d^2$  correspondante. Le schéma en insert rappelle que les résultats présentés sont obtenus pour un réseau infini d’émetteur hémisphériques de facteur d’aspect  $f = 10$ .

température maximale qui atteint  $1259 \text{ K}$ .

Si l’on réitère l’analyse à un champ supérieur au champ de préclaquage d’un émetteur isolé, par exemple  $E = 0.40 \text{ GV/m}$ , on se rend compte que les émetteurs atteignent leur point de fusion dès que la distance dépasse  $5.8 \mu\text{m}$ . Au-delà de cette distance de préclaquage, que l’on baptise  $d_{\text{pb}}$ , l’écrantage devient suffisamment faible pour que le champ local  $F$  au sommet des émetteurs dépasse  $7.9 \text{ GV/m}$  – ce qui vaut  $49.3 \times 0.16 \text{ GV/m} = \beta_{\infty} \times E_{\text{pb}}(\text{isolé})$ . La densité de courant maximale prédit par la résolution électrostatique à  $d_{\text{opt}} = 18 \mu\text{m}$  n’est alors plus physiquement atteignable et on a un changement d’optimum de  $d_{\text{opt}}$  vers  $d_{\text{pb}}$ , qui devient par défaut la distance maximisant le courant.

En élargissant la recherche de  $d_{\text{opt}}$  et  $d_{\text{pb}}$  sur une gamme de champ plus large, on peut alors clairement visualiser le passage du premier optimum à l’autre. Le premier graphique de la figure 4.7 montre qu’une fois le champ de préclaquage  $E_{\text{pb}}$  d’un émetteur isolé dépassé (ligne en tirets rouge), l’espacement doit être fortement diminué (courbe rouge) pour que l’accroissement de l’écrantage maintienne le champ local à sa valeur de préclaquage :  $7.9 \text{ GV/m}$  ici, comme mis en évidence sur

le second graphique. Le troisième graphique montre enfin comment la condition de préclaquage tempère l'augmentation de la densité de courant avec le champ appliqué, jusqu'à atteindre  $\mathcal{J} \sim 2 \times 10^9 \text{ A/m}^2$  au contact des émetteurs ( $d_{pb} = 2.2 \mu\text{m} \sim 2R$ ) sous un champ de  $E \sim 0.8 \text{ GV/m}$  (la valeur prédite par l'optimale électrostatique est quasiment deux ordres de grandeur supérieurs et mènerait bien évidemment à la destruction thermique de tous les émetteurs de la source).

On voit ainsi comment la prise en compte de l'échauffement en 3D permet de trouver un nouveau type d'optimum physique – la distance de préclaquage  $d_{pb}$  – pour les valeurs de champs au-delà desquelles l'optimum électrostatique mènerait à une destruction thermique certaine des émetteurs. On peut ainsi baliser toute la gamme de distance possible, de  $d \rightarrow \infty$  (aucun écrantage) à  $d \rightarrow 2R$  (contact).

Par ailleurs, les arrangements étant alors plus dense (espacement plus faible) la chaleur évacuée par chaque émetteur peut contribuer à l'échauffement de ses voisins. Cet échauffement mutuel, que l'on appellera par la suite *couplage thermique* pourrait être responsable d'une petite partie du courant émis. Ainsi, en plus d'être un très bon moyen pour fixer une limite théorique cohérente sur le champ maximal applicable avant claquage, la modélisation de l'auto échauffement en 3D permet d'affiner l'évaluation de l'émission en allant jusqu'à évaluer l'influence d'un éventuel couplage thermique entre les émetteurs du réseau. Pour déterminer l'amplitude de cette contribution, nous étudions plus en détail dans la section suivante ce phénomène de couplage thermique.

## 4.2 Autoéchauffement en 3D et couplage thermique

Cette section reprend les résultats de modélisation publiés en janvier 2021 dans la revue *Journal of Physics D : Applied Physics* [15].

### 4.2.1 Phénoménologie du couplage thermique

Commençons par introduire la phénoménologie du couplage thermique et sa relation avec l'écrantage électrostatique. Dans le régime d'émission thermo-champ, l'écrantage réduit le courant émis et l'autoéchauffement par voie de conséquence. La figure 4.8 compare justement pour  $f = 1$  la carte en température en régime permanent d'un émetteur isolé (figure 4.8a) avec celle d'un arrangement à deux émetteurs espacés d'une distance  $d = 3R$  (figure 4.8b). Notons qu'une pointe de facteur d'aspect  $f = 1$  correspond d'avantage à une rugosité de surface qu'à des émetteurs micro ou nanofabriqués.

Le champ appliqué dans les deux configurations vaut le champ de préclaquage d'un hémisphère isolé de rapport d'aspect  $f = 1$ , c'est-à-dire  $E = 1.9 \text{ GV/m}$ . Dans le cas à deux émetteurs, la perte de seulement 2.5% de champ au sommet,  $\beta(d = 3R) = 0.975\beta$ , provoque une diminution de la température maximale de 24% : de 1941 K à 1471 K. À cause de l'écrantage électrostatique, les émetteurs à proximité ont besoin d'un champ électrique plus fort que lorsqu'ils sont isolés pour atteindre une situation thermique équivalente.

En poussant l'analyse un peu plus loin cependant, on peut remarquer que dans le deuxième cas, l'évacuation thermique de chaque émetteur est perturbée par celle de son voisin. C'est ce dont témoigne le regroupement des courbes isothermes à partir de celle à 700 K, mise en évidence en blanc sur la figure 4.8b. C'est justement cet effet, lui aussi relié à la proximité des émetteurs, que l'on désigne sous le terme de couplage thermique. Du fait de la symétrie de la configuration par rapport au plan  $(y, z)$  passant par  $x = 0$ , on peut comprendre que toute la chaleur évacuée par le premier émetteur à travers ce plan est récupérée du fait de l'évacuation du second émetteur, *i.e.*,  $\vec{\phi} \cdot \vec{n} = 0$  en  $x = 0$ . Avec un volume de dissipation disponible réduit, la diffusion thermique devient nécessairement moins efficace, ce qui résulte en un équilibre thermique à plus haute température.

On peut quantifier l'influence de cet effet sur la température – et donc sur le courant – de manière indirecte, en comparant systématiquement les résultats de deux simulations indépendantes. La première simulation correspond à la situation 3D normale comme représentée sur la figure 4.8b

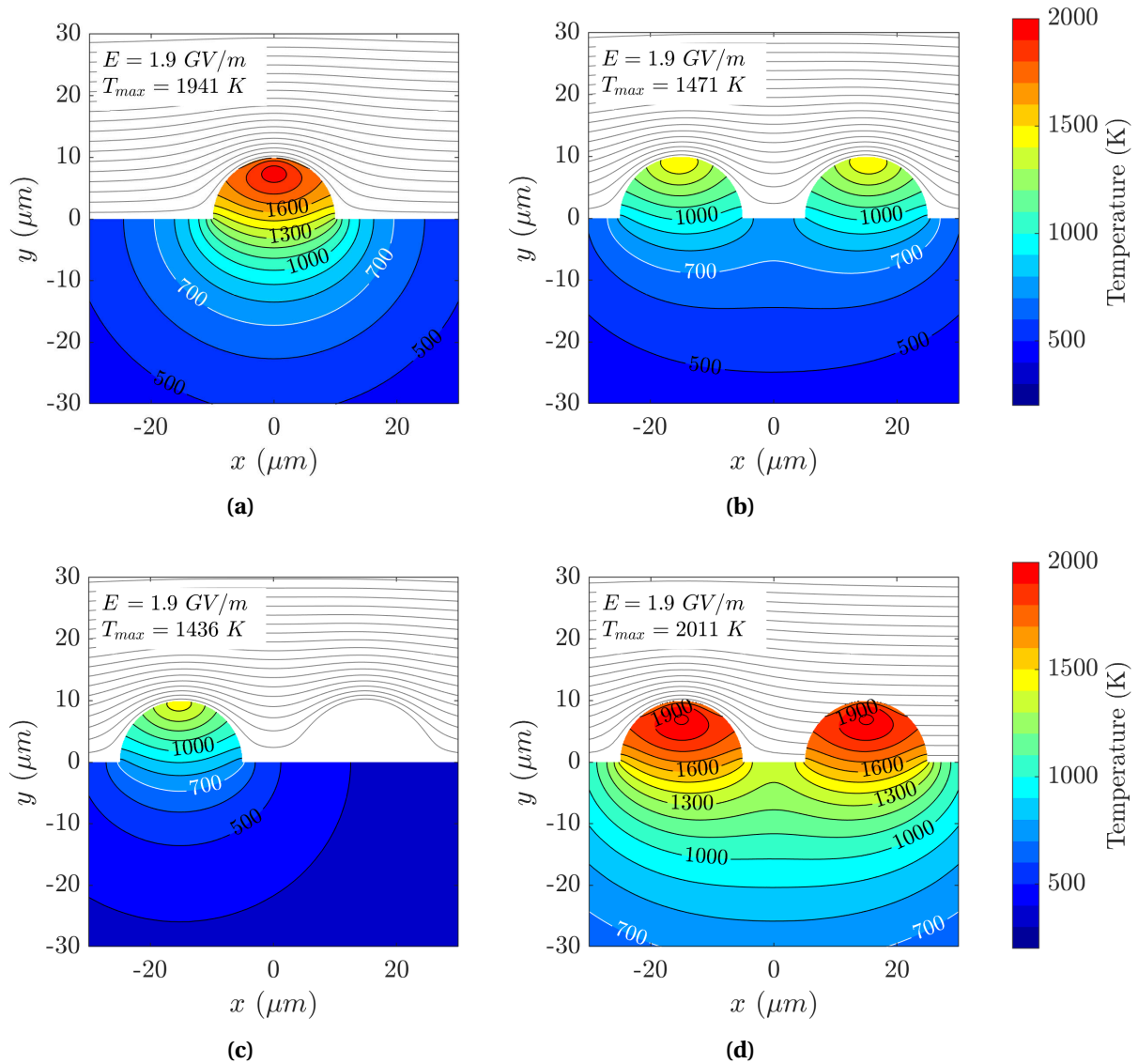


FIGURE 4.8 – Lignes isothermes (courbes inférieures en noir) et lignes isopotentielle (courbes supérieures en gris) sous un champ appliqué  $E = E_{pb}(f = 1)$ . **(a)** : Cas d'un émetteur unique,  $f = 1$ . **(b)** : Cas de deux émetteurs identiques,  $f = 1$  et  $d = 3R$ . **(c)** : Cas de deux émetteurs identiques avec le couplage thermique artificiellement supprimé ("TC-off"),  $f = 1$  et  $d = 3R$ . **(d)** : Cas de deux émetteurs identiques avec l'écrantage électrostatique artificiellement supprimé ("Sc-off"),  $f = 1$  et  $d = 3R$ . Les graphiques sont des coupes 2D le long de l'axe  $x$  de simulations 3D.

rendant bien compte de l'écrantage et du couplage thermique. Pour la deuxième simulation en revanche, l'électrostatique est d'abord bien résolue en 3D pour prendre en compte l'écrantage, mais l'autoéchauffement est traité de manière indépendante pour chaque émetteur<sup>2</sup>. En procédant ainsi, le couplage thermique est artificiellement supprimé. Les résultats correspondants sont estampillés "TC-off" pour *thermal coupling off* en anglais tandis que ceux de la première simulation sont estampillés "TC-on".

On peut ainsi évaluer l'influence du couplage thermique dans l'exemple présenté précédemment. La figure 4.8c montre la distribution en température pour la simulation "TC-off" à deux émetteurs. Elle met en lumière une diminution de la température maximale de 35 K et d'environ 100 K pour la température à la base de l'émetteur (cf. le changement de position de l'isotherme à 700 K entre les figures 4.8b et 4.8c). Bien que ces variations soient faibles, il reste que l'effet du couplage thermique est clairement mis en évidence dans cet exemple.

En fait, l'amplitude relativement faible du couplage thermique est en partie dû à l'écrantage électrostatique. Pour justifier cette assertion, une dernière simulation est faite. Dans cette simulation, l'équation de Laplace est résolue de manière indépendante pour chaque émetteur et le champ qui en résulte est utilisé pour résoudre l'autoéchauffement pour les deux émetteurs simultanément. Ainsi, le couplage thermique est pris en compte, mais l'écrantage électrostatique est artificiellement supprimé. Le résultat est estampillé "Sc-off" pour *Screening off*. La figure 4.8d montre le résultat de cette dernière simulation, qu'il faut alors comparer au premier cas avec un émetteur unique (4.8a). L'effet du couplage thermique en l'absence d'écrantage est alors environ deux fois plus fort (en absolu) : la température maximale augmente de 70 K et l'augmentation à la base est plutôt de l'ordre de 200 K.

#### 4.2.2 Analyse paramétrique du couplage thermique

L'exemple précédent a mis en lumière la phénoménologie du couplage thermique, et sa relation antagoniste à l'écrantage électrostatique. Nous allons maintenant explorer l'influence de la géométrie des émetteurs et de la distance qui les sépare sur le couplage thermique, afin de trouver la gamme qui maximise l'effet de ce phénomène sur le courant émis. *A priori*, cette configuration optimale devrait être trouvée pour des émetteurs densément distribués de manière à limiter au maximum le volume de dissipation thermique, mais toutefois suffisamment espacés pour éviter que l'écrantage ne supprime leur émission. Avec en tête l'idée de trouver les paramètres qui maximisent le couplage thermique, on commence notre étude avec des émetteurs de facteur d'aspect  $f = 1$ . En effet, on a vu dans le chapitre 3 que ces émetteurs étaient ceux dont la distribution en température débordait le plus dans la cathode (cf. Fig. 3.9), et ceux pour qui la contribution thermique au courant était la plus forte du fait d'une émission à un champ localement plus faible. Cependant, les héliellipses de facteurs d'aspect  $f = 1$  ne renforcent le champ à leur sommet que d'un facteur trois ( $\beta = 3$ ). Le champ appliqué pour obtenir une émission thermo-champ est donc particulièrement élevé,  $E > 1 \text{ GV/m}$ . L'analyse qui suit devrait donc plutôt être considérée comme une première exploration, purement théorique, du couplage thermique. Une discussion du phénomène dans des configurations plus proches des conditions expérimentales est donnée dans la sous-section suivante.

Pour quantifier l'influence du couplage thermique sur le courant émis, on compare systématiquement une paire de simulations "TC-on" et "TC-off" : la différence en courant par émetteur entre les deux simulations, respectivement  $I_{\text{on}}$  et  $I_{\text{off}}$ , est notée  $\varepsilon_I$  et s'exprime comme :

$$\varepsilon_I = \frac{I_{\text{on}} - I_{\text{off}}}{I_{\text{on}}} \quad (4.9)$$

2. Dans les cas spécifiques considérés ici, tous les émetteurs étant identiques, l'autoéchauffement n'est résolu que pour un émetteur. Bien que l'émetteur soit alors seul, le système d'équations est toujours résolu en 3D puisqu'à cause de l'écrantage le champ à la surface de l'émetteur n'est plus axisymétrique.

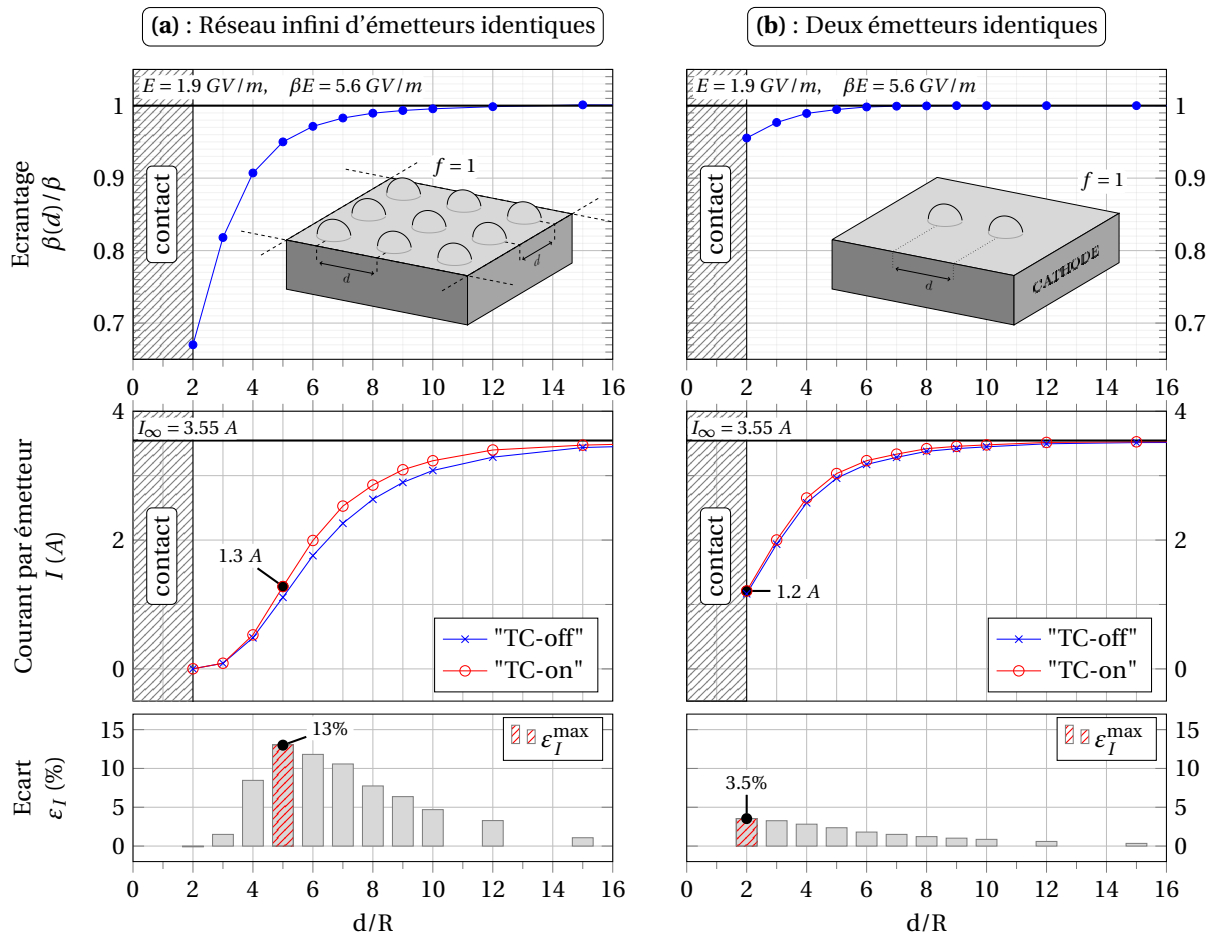


FIGURE 4.9 – Comparaison de l'influence du couplage thermique sur le courant émis entre (a) : une configuration de deux émetteurs identiques et (b) : une configuration en réseau carré infini d'émetteurs identiques pour  $f = 1$ . L'axe  $x$  correspond à l'espacement  $d$  allant de 2 à 16 fois le rayon des émetteurs. Cet axe est identique pour tous les graphiques. Les graphiques supérieurs montrent la variation de l'écrantage avec l'espacement, où  $\beta(d)$  est le renforcement de champ au sommet effectif pour un espacement  $d$  du fait de l'écrantage, et  $\beta$  le renforcement de champ au sommet en l'absence d'écrantage. Les graphiques du milieu comparent la densité de courant émise avec (courbe rouge) et sans (courbe bleue) le couplage thermique. L'écart relatif entre les deux courbes est indiqué sur les graphiques du bas. Cet écart en pourcentage peut être vu comme la proportion de courant émis directement due au couplage thermique entre les émetteurs ( $\epsilon_I$ ). L'écart maximal sur la distance est hachuré en rouge et est noté  $\epsilon_I^{\max}$ .

Dans cette formule,  $I_{\text{on}}$  est pris comme référence, de sorte que  $\varepsilon_I$  est une mesure de la contribution au courant du couplage thermique. Par exemple,  $\varepsilon_I = 4\%$  signifie que 4% du courant  $I_{\text{on}}$  est dû au couplage thermique. Dans l'optique de trouver une limite haute de cette contribution, on cherche la distance  $d$  qui maximise  $\varepsilon_I$ , à la fois pour la configuration à deux émetteurs et la configuration en réseau. Les résultats obtenus sont comparés sur la figure 4.9 pour un champ appliqué  $E = E_{\text{pb}}(f = 1) = 1.9 \text{ GV/m}$  qui donne lieu à un champ au sommet  $F_a = \beta E = 5.6 \text{ GV/m}$ .

Premièrement, il faut noter la différence significative en termes d'écrantage entre les deux configurations, celui-ci étant bien supérieur dans la configuration en réseau. Cela s'explique par le fait qu'un réseau infini se rapproche d'une surface plane à mesure que l'on amène les émetteurs au contact. Dans ce cas limite (Fig. 4.9a, émetteurs au contact dans le réseau infini) le renforcement de champ est diminué d'un tiers,  $\beta(d = 2R) = 0.67\beta$ . En conséquence, le courant émis s'effondre de 3.55 A à seulement 2 mA (une extinction à plus de 99.9%). Aucun autoéchauffement n'est donc observé et le couplage thermique est bien évidemment nul. Dans le cas limite opposé, pour les distances au-delà d'une vingtaine de fois leur rayon, l'écrantage n'a plus de conséquence sur le courant émis. C'est en revanche aussi le cas pour le couplage thermique et le système se comporte alors comme une somme d'émetteurs uniques isolés. Ainsi, la distance  $d$  qui maximise le couplage thermique se trouve entre ces deux cas limites, à  $d = 5R$  dans ce cas précis (mis en évidence par des hachures rouges sur la figure 4.9). À cette valeur on extrait un courant de 1.3 A par émetteur, et la valeur de  $\varepsilon_I$  indique que 13% de ce courant est dû au couplage thermique.

Pour la configuration à deux émetteurs (Fig. 4.9b), la perte de champ ne dépasse pas 5% : on a au contact  $\beta(d = 2R) = 0.95$ . Comme l'écrantage est faible, le couplage thermique est ici maximum lorsque les deux émetteurs sont le plus proche possible, *i.e.* en contact. Le courant émis  $I = 1.2 \text{ A}$  est proche de celui émis à l'optimum dans le cas du réseau (valeur de champ quasi identique), mais la contribution du couplage thermique ne s'élève ici qu'à 3.5%. Comme on pouvait s'y attendre, un plus fort couplage thermique est trouvé dans le cas du réseau infini : plus la répartition d'émetteur est dense, plus le volume disponible par émetteur pour évacuer la chaleur est petit. Néanmoins, les valeurs observées de  $\varepsilon_I^{\text{max}}$  sont dans l'ensemble plutôt faibles étant donné que, ayant été obtenu à  $f = 1$  elles sont censées être des limites supérieures. Cela confirme que dans l'émission par effet de champ, le couplage thermique reste un effet du second ordre devant l'écrantage électrostatique. Ce dernier ayant le premier rôle, il diminue d'ailleurs l'amplitude du couplage thermique. En effet, en supprimant artificiellement l'écrantage dans les simulations, toutes choses égales par ailleurs, la contribution du couplage thermique est quasiment doublée :  $\varepsilon_I$  à  $2R = 7.9\%$  pour la configuration à deux émetteurs et  $\varepsilon_I$  à  $5R = 25\%$  pour la configuration en réseau infini (cette valeur n'étant d'ailleurs plus la valeur maximale).

Pour aller plus loin, on peut effectuer la même analyse sur l'écart  $\varepsilon_I$  pour des facteurs d'aspect plus grands et chercher la distance  $d$  qui maximise l'écart. Les résultats sont limités à la configuration en réseau, étant donné que le couplage thermique serait plus faible pour des arrangements d'émetteurs moins denses. Comme pour  $f = 1$ , on lance systématiquement une paire de simulations avec ("TC-on") et sans ("TC-off") couplage thermique sur une large gamme de distance, avec un pas égal au rayon  $R$  de l'émetteur. Le champ appliqué est pour chaque  $f$  le champ de préclaquage trouvé au chapitre 3 (*cf.* figure 3.6). La valeur de  $\varepsilon_I^{\text{max}}$  est obtenue à partir de la paire de simulations exhibant le plus grand écart, et la distance correspondante est noté  $d_*$ . Les résultats sont présentés sur la figure 4.10 et dans le tableau 4.1, avec en plus les valeurs de champ  $E$ , l'espacement à la valeur maximale  $d_*$ , et la température maximale atteinte. On voit que la contribution du couplage thermique au courant devient rapidement négligeable pour les facteurs d'aspect supérieurs à un : partant d'une valeur de 13% à  $f = 1$ ,  $\varepsilon_I^{\text{max}}$  tombe à 2.2% pour  $f = 4$ . En fait, comme on a pu le voir au chapitre 3 sur la figure 3.9, les émetteurs plus profilés accumulent moins de chaleur et provoquent donc une augmentation plus faible de la température à leur base. Le couplage thermique ne peut donc avoir lieu qu'à des distances plus faibles, distances auxquelles l'écrantage électrostatique réduit très fortement l'autoé-

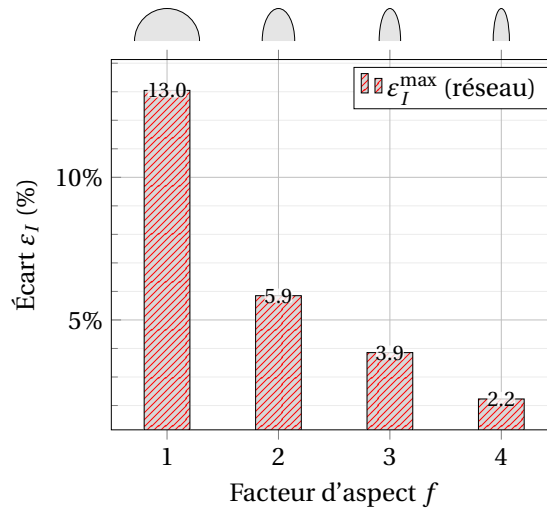


FIGURE 4.10 – Contribution maximale du couplage thermique au courant  $\epsilon_I^{\max}$  pour différents facteurs d'aspect  $f$ . Les espacements correspondants qui maximisent cette contribution sont donnés dans le tableau 4.1, avec aussi les valeurs de champ et de température maximale.

chauffement. Cette affirmation est soutenue par la valeur de  $d_*$  qui décroît de  $50 \mu m$  pour  $f = 1$  à  $25 \mu m$  pour  $f = 4$ . Cela a pour conséquence de doubler la perte de champ local du fait d'un écrantage qui passe alors de  $-5.23\%$  à  $-10.6\%$  (table 4.1).

Pour  $f > 4$ , le couplage thermique devient trop faible pour être observé aux larges distances ( $> 30 \mu m$ ), et est supprimé par l'écrantage électrostatique aux courtes distances ( $< 25 \mu m$ ). Entre les deux, plusieurs maxima locaux apparaissent, comme autant de compromis entre une plus grande proximité ou un écrantage plus léger. Dans l'ensemble, ces maxima correspondent à des contributions négligeables au courant,  $\epsilon_I < 2\%$  qui se noie dans les erreurs liés au maillage.

Il est en effet important de noter que chaque simulation est entachée d'une erreur numérique. Cette erreur provient typiquement du maillage qui, pour des raisons évidentes de temps de calcul, ne peut pas être raffiné à l'infini (cf. annexe G). Comme le maillage est généré à nouveau pour chaque simulation, deux simulations d'une même paire "TC-on" et "TC-off" peuvent avoir une erreur numérique différente sur le courant qui peut se compenser ou s'amplifier dans le calcul de  $\epsilon_I$ , ce qui rend difficile l'évaluation précise de  $d_*$ . Compte tenu du temps de calcul de l'ordre de l'heure pour une simulation 3D complète, il n'a pas été envisagé de déterminer cette erreur *via* une analyse statistique systématique sur de nombreuses répétitions de chaque configuration. Toutefois, l'erreur sur le courant avec le maillage choisi pour nos simulations 3D est typiquement de l'ordre du pourcent (cf. annexe G). Par conséquent, les valeurs de  $\epsilon_I$  en deça de quelques pourcents ne peuvent plus être distingué du "bruit numérique".

Dans l'ensemble, les résultats de la figure 4.10 mettent en évidence la difficulté d'obtenir un couplage thermique notable dans le cas d'émetteurs profilés. Cependant, le champ appliqué a jusqu'ici été limité au champ de préclaquage pour un *émetteur isolé*. Avec d'autres émetteurs dans son voisinage, l'émetteur requiert en fait un plus grand champ appliqué pour atteindre à nouveau son point de fusion. La température maximale atteinte pour les données présentées sur la figure 4.10 est par conséquent en deça de la température de fusion. On a en effet  $T_{\max}^{\text{on}} = 1316 K$  pour  $f = 1$  et seulement  $T_{\max}^{\text{on}} = 962 K$  pour  $f = 4$  (cf. tableau 4.1). En augmentant le champ appliqué jusqu'au champ de préclaquage effectif, les valeurs de  $\epsilon_I$  pourraient éventuellement devenir notables pour les facteurs d'aspect plus grands. Dans ces conditions, il devient difficile de fixer une limite supérieure sur l'amplitude du couplage thermique sans mettre une limite sur le champ appliqué lui-même. Le problème étant que notre ancienne limite, le champ de préclaquage pour un émetteur isolé, n'est plus vraiment pertinente pour un arrangement de plusieurs émetteurs. Nous proposons quelques éléments de réponse à ce problème dans la sous-section suivante.



Quantité	Unité	$f = 1$	2	3	4
$\beta$	–	3.0	5.8	9.2	13.3
$E$	$GV/m$	1.9	1.1	0.72	0.52
$d_*/R$	–	5	7	9	10
$d_*$	$\mu m$	50	35	30	25
$\beta(d_*)/\beta$	%	94.8	92.3	92.1	89.4
$\beta(d_*)E$	$GV/m$	5.32	5.73	6.08	6.13
$T_{\max}^{\text{off}}$	$K$	1167	1100	1171	923
$T_{\max}^{\text{on}}$	$K$	1316	1187	1229	962
$\varepsilon_I^{\max}$	%	13.0	5.9	3.9	2.2

TABLE 4.1 – Valeurs de champ, de température et d’espacement du réseau correspondant aux résultats de la figure 4.10. Les différentes grandeurs sont définies dans le manuscrit. La hauteur  $H$  est de  $10\mu m$  pour tous les émetteurs.

### 4.2.3 Amplitude du couplage thermique en conditions expérimentales

En modélisation, les processus physiques peuvent être isolés les uns des autres. En outre, il n’y a pas de limite intrinsèque à l’amplitude de nos paramètres. Dans le cas de l’expérience en revanche, les champs électriques appliqués en DC sont généralement inférieurs au gigavolt par mètre. D’une part la tension maximale que peut délivrer un générateur est limitée. D’autre part, une grande diversité de phénomènes physiques que nous ne prenons pas en compte dans nos modélisations peuvent survenir dans la pratique, éventuellement se coupler, et causer un claquage électrique à des valeurs de champs inférieures à celles prédites par la simple théorie de l’évaporation d’un émetteur micrométrique idéalisé. Dans les montages expérimentaux étudiant les performances de sources d’électrons basées sur l’émission de champ, les champs appliqués s’étendent généralement de quelques volts par micromètre dans le cas de nanostructures de carbone offrant un fort renforcement de champ ( $E \gtrsim 10^6 V/m$ ) jusqu’à quelques dixièmes de gigavolt par mètre pour les structures moins profilées ( $E \gtrsim 10^8 V/m$ ) [16]. Dans le cas des machines à très haute tension sous vide, les accélérateurs modernes comme CLIC – le *Compact Linear Collider* au CERN – opèrent à des champs RF atteignant généralement plusieurs centaines de mégavolts par mètre [17]. Des études menées au CERN se sont par exemple penchées sur la tenue aux hautes tensions en DC de systèmes accélérateurs et ont mesuré des champs de claquage allant de 100 à 800  $MV/m$  [18].

Avec ces ordres de grandeur en tête, nous achevons notre exploration du couplage thermique par une dernière étude dont le but est de déterminer *via*  $\varepsilon_I$  l’amplitude maximale du couplage thermique pour un réseau infini d’émetteurs sous un champ appliqué fixé à  $0.4 GV/m$ . Si l’on se réfère aux gammes d’émission présentées au chapitre 3 sur la figure 3.7, on voit que  $0.4 GV/m$  est en dessous du champ  $E_{\min}$  des émetteurs de facteur d’aspect  $f < 5$ .  $E_{\min}$  avait été défini pour chaque facteur d’aspect comme le champ auquel l’émetteur émet un millièème de son courant de préclaquage. On ne pourra donc pas observer d’autoéchauffement pour ces émetteurs (avec  $f < 5$ ), dont le renforcement de champ au sommet est inférieur à  $\beta = 17.9$  (valeur qui correspond à un facteur d’aspect de  $f = 5$ ). Les émetteurs héliellipsoïdaux dont le courant émis à  $E = 0.4 GV/m$  pourra mener à un autoéchauffement notable ont un facteur d’aspect  $f \geq 5$ . Par conséquent, une dernière série de simulation est faite pour des facteurs d’aspect allant de  $f = 5$  à  $f = 10$  avec  $E$  fixé à  $0.4 GV/m$ .

Notons que cette valeur est bien au-dessus du champ de préclaquage des émetteurs isolés pour  $f > 5$ . Dans un réseau infini cependant, du fait de l’écrantage électrostatique, il doit exister pour

chaque facteur d'aspect un espacement unique auquel les émetteurs du réseau atteignent tout juste leur point de fusion. Cette distance correspond à la définition de distance de précalquage  $d_{pb}$  introduite dans la sous-section 4.1.3. Pour chaque facteur d'aspect, une recherche dichotomique permet de trouver  $d_{pb}$  avec une précision fixée au pourcent près sur la température de fusion. Les valeurs trouvées sont consignés dans le tableau 4.2.

Pour chacun des espacements  $d_{pb}(f)$ , on lance une paire de simulations "TC-on" et "TC-off" comme décrit précédemment : la première simulation prend en compte le couplage thermique tandis qu'il est artificiellement supprimé dans la deuxième simulation. Les grandeurs pertinentes pour la comparaison entre les différents facteurs d'aspect sont regroupés dans le tableau 4.2.

Bien évidemment, comme les émetteurs plus profilés ont un meilleur renforcement de champ, ils peuvent émettre en régime thermo champ tout en subissant un plus fort écrantage que ne le peuvent les émetteurs à plus petit facteur d'aspect. C'est la raison pour laquelle  $d_{pb}$  est plus petit pour les  $f$  plus grands. Par exemple, pour  $f = 6$  la condition de précalquage est atteinte à  $d_{pb} = 16.1 \mu m$ , sous une perte de champ de 21.5%, tandis que  $d_{pb} = 5.8 \mu m$  pour  $f = 10$ , ce qui induit une perte de champ presque trois fois plus importante de 60.4%. Malgré une contribution thermique au courant plus faible pour les émetteurs plus profilés mise en évidence dans le chapitre 3, le champ électrique appliqué de  $0.4 \text{ GV/m}$  permet une plus grande proximité pour les facteurs d'aspect plus grand, ce qui accroît l'influence du couplage thermique. On trouve ainsi une contribution au courant plus importante pour  $f = 10$  :  $\varepsilon_I = 14.5\%$  que pour  $f = 6$  :  $\varepsilon_I = 6.2\%$ .

Ce résultat remarquable confirme que l'obstacle principal à une contribution notable du couplage thermique à l'émission thermo champ est l'écrantage électrostatique. Quand ce dernier est compensé par un champ appliqué plus fort, la contribution du couplage thermique peut devenir notable. Dans le cas présent,  $\varepsilon_I \gtrsim 10\%$  avec  $d \lesssim H$  pour des émetteurs profilés avec des renforcements de champ typiques  $20 < \beta < 50$ .

Des configurations proches de notre situation idéalisée s'observent dans les réseaux d'émetteurs à effet de champ. Par exemple, dans la référence [19], les auteurs étudient deux différents réseaux faits d'émetteurs en molybdène et dioxyde de silicium avec une hauteur de  $H \gtrsim 1 \mu m$  et  $H \gtrsim 10 \mu m$ , respectivement séparés d'une distance  $d \sim 2 \mu m$  et  $d \gtrsim 10 \mu m$ . À partir de leur caractéristique I-V, on peut estimer grossièrement que leur renforcement de champ se situe dans la fourchette  $10^1 < \beta < 10^2$ . Par ailleurs l'ordre de grandeur donné sur le rayon de courbure des émetteurs permet d'évaluer la gamme de densité de courant par émetteur :  $10^8 < J < 10^{10} \text{ A/m}^2$ , ce qui recoupe bien la gamme explorée dans notre étude. Nos résultats suggèrent ainsi qu'une petite partie du courant extrait en régime de haute densité de courant dans les configurations similaires à celle de Spindt *et al.* [19] pourrait être due au couplage thermique entre les émetteurs voisins. Dans les configurations idéalisées que nous avons modélisées, cette contribution s'élevait jusqu'à  $\sim 15\%$ .

Quantité	Unité	$f = 5$	6	7	8	9	10
$\beta$	–	17.9	23.1	28.9	35.2	42.0	49.3
$E$	$GV/m$	0.4					
$d_{pb}/R$	–	25.0	9.7	7.1	7.0	6.3	5.8
$d_{pb}$	$\mu m$	50.0	16.1	10.1	8.7	7.0	5.8
$\beta(d_{pb})/\beta$	%	98.7	78.5	63.9	53.5	45.5	39.6
$F_a$	$GV/m$	7.01	7.25	7.39	7.53	7.64	7.81
$T_{max}^{off}$	$K$	1907	1887	1840	1844	1789	1791
$T_{max}^{on}$	$K$	$T_M : 1941 K \pm 1\%$					
$I_{off}$	$mA$	103.3	63.3	38.9	27.5	18.6	14.3
$I_{on}$	$mA$	106.0	67.5	42.6	30.2	20.9	16.7
$\varepsilon_I$	%	2.5	6.2	9.0	8.9	11.0	14.5

TABLE 4.2 – Comparaison à l’espacement de préclaquage  $d_{pb}$  de la température maximale et du courant émis entre une simulation avec couplage thermique ("TC-on") et sans ("TC-off"). Est déduite de cette comparaison la contribution au courant du couplage thermique  $\varepsilon_I$ . Le champ local au sommet de l’émetteur et le renforcement de champ effectif  $\beta(d_{pb})$  sont aussi donnés pour plus de clarté. Le champ appliqué vaut  $E = 0.4 GV/m$ . La comparaison est par conséquent limitée aux facteurs d’aspect  $f = 10$  à  $f = 5$  puisque les émetteurs de facteurs d’aspect en deçà de 5 n’émettent plus dans le régime thermo-champ à  $0.4 GV/m$ . La hauteur des émetteurs est toujours de  $10 \mu m$ .

### 4.3 Conclusion

Compte tenu de l’importante puissance de calcul requise par les résolutions temporelles en géométrie 3D, les modélisations de l’émission électronique ont toujours réservé la physique de l’échauffement des émetteurs à des cas 1D ou 2D. Pourtant, il est aujourd’hui possible de modéliser cet échauffement dans des temps raisonnables sur une station de travail actuelle pour des configurations idéalisées d’émetteurs identiques présentant des plans de symétrie simplificateurs (de l’ordre de plusieurs dizaines de minutes à quelques heures par simulation, avec 32 Go de RAM et un processeur Intel i3-4150 cadencé à 3.5 GHz).

Intégrer la modélisation de l’échauffement aux études d’optimisation de l’espacement dans les réseaux d’émetteurs pour les sources types FEA a permis de remettre en perspective l’analyse habituelle basée sur une considération purement électrostatique du problème. En effet, à champ fort, la distance optimale prédite implique une émission tellement intense qu’il est évident que la destruction thermique des émetteurs rend cet optimum inatteignable. À l’inverse, la prise en compte de l’échauffement permet de déterminer la distance au-delà de laquelle une destruction thermique risque d’avoir lieu. Il a été ainsi possible de mettre en évidence l’apparition d’un nouveau type d’optimum à champ fort qui consiste à maintenir tous les émetteurs juste en dessous de la densité de courant critique au-delà de laquelle la destruction thermique interviendrait.

Ces optimums correspondant à des réseaux bien plus denses à mesure que le champ augmente (pour que l’écrantage maintienne l’émission en deçà du seuil critique), il est apparu possible qu’une partie du courant émis soit due à un phénomène de couplage thermique (l’évacuation thermique de chaque émetteur contribue à l’échauffement de ses voisins). L’étude approfondie de ce phénomène dans un second temps a permis de confirmer et de quantifier cette possibilité. Les résultats de ce chapitre ont toutefois montré que le couplage thermique avait une influence de second ordre sur l’émission devant l’écrantage électrostatique. Son amplitude a été trouvée de l’ordre de la dizaine

de pourcents dans les cas qui lui sont le plus favorable (haute densité d'émetteurs sous un champ électrique compensant l'écrantage).

En fait, dans la plupart des autres configurations (réseau plus espacé et/ou échauffement moindre), le couplage thermique est tout à fait négligeable. En dehors des cas types identifiés dans ce chapitre, l'échauffement de chaque émetteur est donc totalement indépendant de celui des autres. La seule interaction à prendre en compte est l'écrantage électrostatique. De ce fait, résoudre les équations couplées de la chaleur et du courant en 3D apparaît comme un coût quelque peu excessif pour un gain limité. C'est d'ailleurs certainement l'argument intuitif utilisé qui explique que la modélisation thermique a systématiquement été réservée à des géométries 1D et 2D. Pour pallier ce problème, le chapitre suivant développe une solution permettant de transposer en 2D les effets de l'écrantage en 3D, afin de résoudre ensuite indépendamment l'échauffement de chaque émetteur en 2D.

## Références du chapitre 4

« Nous ne faisons que nous entregloser. [...] Nous échelonons ainsi de degré en degré. Et advient de là que le plus haut monté a souvent plus d'honneur que de mérite. Car il n'est monté que d'un grain sur les épaules du pénultième. »

– Michel de Montaigne  
(Essais, 1595)

- [1] Fernando F DALL'AGNOL, Thiago A de ASSIS et Richard G FORBES. « Physics-based derivation of a formula for the mutual depolarization of two post-like field emitters ». en. In : *Journal of Physics : Condensed Matter* 30.37 (sept. 2018), p. 375703. ISSN : 0953-8984, 1361-648X. DOI : [10.1088/1361-648X/aad84c](https://doi.org/10.1088/1361-648X/aad84c). URL : <http://stacks.iop.org/0953-8984/30/i=37/a=375703?key=crossref.9f4e6bd65048f3012e2c03e82d6c8031> (cf. p. 107, 108).
- [2] Wilkin TANG et al. « Experimental Study of Electric Field Screening by the Proximity of Two Carbon Fiber Cathodes ». In : *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics : Materials, Processing, Measurement, and Phenomena* 30.6 (nov. 2012), p. 061803. ISSN : 2166-2746, 2166-2754. DOI : [10.1116/1.4759254](https://doi.org/10.1116/1.4759254) (cf. p. 107).
- [3] J.-M. BONARD et al. « Tuning the Field Emission Properties of Patterned Carbon Nanotube Films ». In : *Advanced Materials* 13.3 (2001), p. 184-188. ISSN : 1521-4095. DOI : [10.1002/1521-4095\(200102\)13:3<184::AID-ADMA184>3.0.CO;2-I](https://doi.org/10.1002/1521-4095(200102)13:3<184::AID-ADMA184>3.0.CO;2-I). URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/1521-4095%28200102%2913%3A3%3C184%3A%3AAID-ADMA184%3E3.0.CO%3B2-I> (cf. p. 107).
- [4] S. H. JO et al. « Effect of length and spacing of vertically aligned carbon nanotubes on field emission properties ». In : *Applied Physics Letters* 82.20 (mai 2003). Publisher : American Institute of Physics, p. 3520-3522. ISSN : 0003-6951. DOI : [10.1063/1.1576310](https://doi.org/10.1063/1.1576310). URL : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1576310> (cf. p. 107).
- [5] J. R. HARRIS, K. L. JENSEN et D. A. SHIFFLER. « Dependence of optimal spacing on applied field in ungated field emitter arrays ». In : *AIP Advances* 5.8 (août 2015). Publisher : American Institute of Physics, p. 087182. DOI : [10.1063/1.4929983](https://doi.org/10.1063/1.4929983). URL : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4929983> (cf. p. 107, 108).
- [6] Martin DIONNE, Sylvain COULOMBE et Jean-Luc MEUNIER. « Screening Effects Between Field-Enhancing Patterned Carbon Nanotubes : A Numerical Study ». en. In : *IEEE Transactions on Electron Devices* 55.6 (juin 2008), p. 1298-1305. ISSN : 0018-9383, 1557-9646. DOI : [10.1109/TED.2008.920995](https://doi.org/10.1109/TED.2008.920995) (cf. p. 108).
- [7] Johannes BIEKER et al. « Simulation-Based Model of Randomly Distributed Large-Area Field Electron Emitters ». en. In : *IEEE Journal of the Electron Devices Society* 7 (2019), p. 997-1006. ISSN : 2168-6734. DOI : [10.1109/JEDS.2019.2940086](https://doi.org/10.1109/JEDS.2019.2940086) (cf. p. 108).

- [8] Thiago A. DE ASSIS, Fernando F. DALL'AGNOL et Marc CAHAY. « Universal Trade-off between Proximity and Aspect-Ratio in Optimizing the Field Enhancement Factor of Large Area Field Emitters ». en. In : *Applied Physics Letters* 116.20 (mai 2020), p. 203103. ISSN : 0003-6951, 1077-3118. DOI : [10.1063/5.0010140](https://doi.org/10.1063/5.0010140) (cf. p. 108).
- [9] Kevin L. JENSEN. « Electron Emission Theory and Its Application : Fowler–Nordheim Equation and Beyond ». In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 21.4 (2003), p. 1528. ISSN : 0734211X. DOI : [10.1116/1.1573664](https://doi.org/10.1116/1.1573664) (cf. p. 108, 110).
- [10] Richard G. FORBES, C. J. EDGCOMBE et U. VALDRÈ. « Some Comments on Models for Field Enhancement ». In : *Ultramicroscopy*. IFES 2001 95 (mai 2003), p. 57-65. ISSN : 0304-3991. DOI : [10.1016/S0304-3991\(02\)00297-8](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(02)00297-8) (cf. p. 110).
- [11] Dohyung KIM, Jean-Eric BOURÉE et Sang Youl KIM. « Calculation of the Field Enhancement for a Nanotube Array and Its Emission Properties ». In : *Journal of Applied Physics* 105.8 (avr. 2009), p. 084315. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.3091282](https://doi.org/10.1063/1.3091282) (cf. p. 111).
- [12] Nannan LI et al. « Study of the Electric Field Screening Effect for Field Emitter Arrays ». In : *Journal of the Korean Physical Society* 66.8 (avr. 2015), p. 1186-1191. ISSN : 0374-4884, 1976-8524. DOI : [10.3938/jkps.66.1186](https://doi.org/10.3938/jkps.66.1186) (cf. p. 111).
- [13] V. CHOUHAN, T. NOGUCHI et S. KATO. « Field Emission from Optimized Structure of Carbon Nanotube Field Emitter Array ». In : *Journal of Applied Physics* 119.13 (avr. 2016), p. 134303. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.4945581](https://doi.org/10.1063/1.4945581) (cf. p. 111).
- [14] Matthew T. COLE et al. « Deterministic Cold Cathode Electron Emission from Carbon Nanofibre Arrays ». en. In : *Scientific Reports* 4.1 (mai 2014). Number : 1 Publisher : Nature Publishing Group, p. 4840. ISSN : 2045-2322. DOI : [10.1038/srep04840](https://doi.org/10.1038/srep04840). URL : <https://www.nature.com/articles/srep04840> (visité le 05/01/2021) (cf. p. 111).
- [15] Darius MOFAKHAMI et al. « Thermal Effects in Field Electron Emission from Idealized Arrangements of Independent and Interacting Micro-Protrusions ». In : *Journal of Physics D : Applied Physics* (jan. 2021). ISSN : 0022-3727, 1361-6463. DOI : [10.1088/1361-6463/abd9e9](https://doi.org/10.1088/1361-6463/abd9e9) (cf. p. 114).
- [16] Yunhan LI, Yonghai SUN et J. T. W. YEOW. « Nanotube field electron emission : principles, development, and applications ». en. In : *Nanotechnology* 26.24 (juin 2015), p. 242001. ISSN : 0957-4484, 1361-6528. DOI : [10.1088/0957-4484/26/24/242001](https://doi.org/10.1088/0957-4484/26/24/242001). URL : <http://stacks.iop.org/0957-4484/26/i=24/a=242001?key=crossref.6ef13267b02617c10ca468a1c7638a01> (visité le 13/11/2018) (cf. p. 120).
- [17] Juwen WANG et al. « Fabrication Technologies of the High Gradient Accelerator Structures at 100MV/M Range ». English. In : *Conf.Proc.C100523 :THPEA064,2010* SLAC-PUB-15146 (juill. 2012) (cf. p. 120).
- [18] A. DESCOEUDRES et al. « Dc Breakdown Conditioning and Breakdown Rate of Metals and Metallic Alloys under Ultrahigh Vacuum ». In : *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 12.3 (mars 2009), p. 032001. DOI : [10.1103/PhysRevSTAB.12.032001](https://doi.org/10.1103/PhysRevSTAB.12.032001) (cf. p. 120).
- [19] C.A. SPINDT. « Microfabricated field-emission and field-ionization sources ». en. In : *Surface Science* 266.1-3 (avr. 1992), p. 145-154. ISSN : 00396028. DOI : [10.1016/0039-6028\(92\)91012-Z](https://doi.org/10.1016/0039-6028(92)91012-Z). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/003960289291012Z> (visité le 27/04/2020) (cf. p. 121).

## Chapitre 5

# Simplification 3D vers $N \times 2D$ pour la modélisation d'une assemblée d'émetteurs proches

*« Simplifier les causes, et généraliser les effets, doit être le but du physicien. »*

---

Georges Louis Leclerc, comte de Buffon  
(Histoire naturelle des minéraux – 1778)

### Sommaire

---

<b>5.1 Ecrantage et dissymétrie</b> . . . . .	<b>126</b>
5.1.1 Faible dissymétrie et moyenne orthoradiale de la distribution en champ . . . . .	126
5.1.2 Erreur en cas de forte dissymétrie . . . . .	129
<b>5.2 Méthode de réduction 3D vers <math>N \times 2D</math></b> . . . . .	<b>131</b>
5.2.1 Détail mathématique . . . . .	132
5.2.2 Application en forte dissymétrie . . . . .	133
5.2.3 Intégration de la simplification 3D vers $N \times 2D$ dans notre algorithme de simulation . . . . .	133
<b>5.3 Performance pour l'auto-échauffement d'un réseau d'émetteurs sphère-sur-cône</b> .	<b>136</b>
<b>5.4 Conclusion</b> . . . . .	<b>139</b>

---

Lorsque l'on veut modéliser une assemblée d'émetteurs proches les uns des autres, la prise en compte de l'écrantage électrostatique et du couplage thermique entre les émetteurs nécessite l'utilisation d'une géométrie 3D. Le maillage bien plus conséquent dans ce cas nécessite une puissance de calcul nettement plus importante que dans le cas 2D d'un émetteur unique axisymétrique. Si la forte sensibilité du courant avec le champ rend la modélisation de l'écrantage électrostatique absolument nécessaire, le chapitre précédent a montré que le couplage thermique a une influence bien plus légère sur l'émission. En délimitant sommairement la gamme de paramètres spécifiques donnant un couplage thermique notable, on a finalement montré que les émetteurs étaient thermiquement indépendants dans la majorité des configurations. Ainsi, modéliser l'autoéchauffement en 3D n'a généralement pas d'autre intérêt que de permettre la prise en compte de la distribution 3D du champ à la surface de l'émetteur, incluant l'écrantage. Compte tenu du temps de calcul particulièrement important pour résoudre temporellement l'autoéchauffement, on aimerait pouvoir se contenter d'une simple résolution 2D axisymétrique pour chaque émetteur. Malheureusement, la distribution de champ à la surface d'émetteurs à proximité d'autres émetteurs de dimension quelconque perd de fait sa symétrie axiale.

La question émerge alors de savoir s'il est possible de symétriser intelligemment cette distribution asymétrique de champ 3D afin de pouvoir obtenir ensuite pour chaque émetteur une émission la plus

proche possible de la solution 3D *via* une simple résolution 2D axisymétrique de l'autoéchauffement. C'est à cette question que le présent chapitre se propose d'apporter une réponse.

Une première section pose les termes du problème à travers le cas type de deux émetteurs hémisphériques proches. La dissymétrie étant relativement faible dans ce cas, nous montrons dans un premier temps que l'utilisation d'une simple moyenne orthoradiale du champ 3D suffit à retrouver un courant équivalent en 2D. Cette méthode s'avère toutefois peu satisfaisante pour des configurations nettement plus dissymétriques. C'est la raison pour laquelle la deuxième section développe une méthode plus robuste, qui consiste à trouver la distribution radiale de champ (2D) qui minimise l'erreur sur le courant. Cette méthode est alors intégrée dans notre algorithme de simulation et ses performances sont éprouvées en troisième section en configuration de fort échauffement pour montrer la robustesse de la prédiction en température, jusqu'au cas limite de l'apparition d'un couplage thermique.

## 5.1 Ecrantage et dissymétrie

### 5.1.1 Faible dissymétrie et moyenne orthoradiale de la distribution en champ

Commençons par le cas 3D le plus simple étudié jusqu'ici dans cette thèse : deux émetteurs hémisphériques identiques en titane ( $\varphi = 4.3 \text{ eV}$ ), de hauteur  $H = 10 \text{ }\mu\text{m}$  et de rayon  $R = 1 \text{ }\mu\text{m}$  (facteur d'aspect  $f = 10$ ), séparés d'une distance  $d = 3R = 0.3H$  (cf. Fig. 5.1a). L'équation de Laplace étant toutefois invariante d'échelle, la situation ne dépend que de  $f$  et de  $d$ . La valeur du champ  $E$ , elle, a essentiellement un impact sur la valeur du courant émis. En fixant un champ global  $E = 0.16 \text{ GV/m}$  on obtient un courant de  $3.295 \text{ mA}$  par émetteur et une température maximale de  $876 \text{ K}$ , là où un émetteur unique émettait  $17 \text{ mA}$  et atteignait  $1941 \text{ K}$  (cf. Chapitre 3 :  $0.16 \text{ GV/m}$  correspondait au champ de préclaquage de cet émetteur). Cette différence est bien entendu causée par l'écrantage entre les deux émetteurs.

Mais au-delà de la diminution de l'émission électronique (et donc de l'échauffement) induite par l'écrantage, ce qui nous intéresse dans ce chapitre c'est la perte de symétrie axiale du champ  $F$  à la surface des émetteurs du fait de leur proximité. La figure 5.1b montre la distribution de champ au sommet de l'émetteur de gauche sur la figure 5.1a. Si la situation semble assez peu dissymétrique, on voit tout de même que les équipotentielles ne sont plus des cercles concentriques, mais des ellipses dont le centre s'éloigne dans la direction opposée au second émetteur.

Pour quantifier plus précisément cette dissymétrie, les figures 5.1c et 5.1d montrent respectivement la variation radiale ( $r$ ) et orthoradiale ( $\theta$ ) du champ pour l'émetteur de gauche. On voit alors que le champ est bien maximal le long de l'arête tournant le dos au second émetteur (Fig. 5.1c, courbe rouge à  $\theta = \pi$ ) et minimal le long de l'arête qui lui fait face (Fig. 5.1c, courbe bleue à  $\theta = 0$ ). L'étendue<sup>1</sup>  $\Delta F(r)$  entre ces deux extrêmes (normalisée par la moyenne orthoradiale) est renseignée sur la figure 5.1d pour trois valeurs de  $r$ . Elle vaut  $-1.7\%$  à  $r = 0.04R$  et s'amplifie à mesure que l'on s'éloigne du sommet (dissymétrie accrue à la base).

En dehors de la zone d'émission, les valeurs du champ n'ont toutefois plus d'impact sur le courant. Dans le cas présent à  $E = 0.16 \text{ GV/m}$ , l'étude du courant émis permet de déterminer le rayon à 90% d'émission (c'est-à-dire le rayon jusqu'auquel il faut intégrer à partir du sommet pour obtenir 90% du courant de l'émetteur) :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\langle R_{90\%} \rangle_\theta} J(r, \theta) dr d\theta = 0.9I \quad \Rightarrow \quad \langle R_{90\%} \rangle_\theta = 0.08R$$

À  $r = 0.08R$ ,  $\Delta F$  vaut  $-2.9\%$ . Si la dissymétrie dans la zone d'émission peut alors paraître assez faible, rappelons tout de même que la densité de courant est très sensible aux variations de champ.

1. L'étendue normalisée donne une bonne estimation de la dissymétrie dans ce cas précis, bien qu'on puisse lui préférer l'écart-type de la distribution orthoradiale en d'autres circonstances.

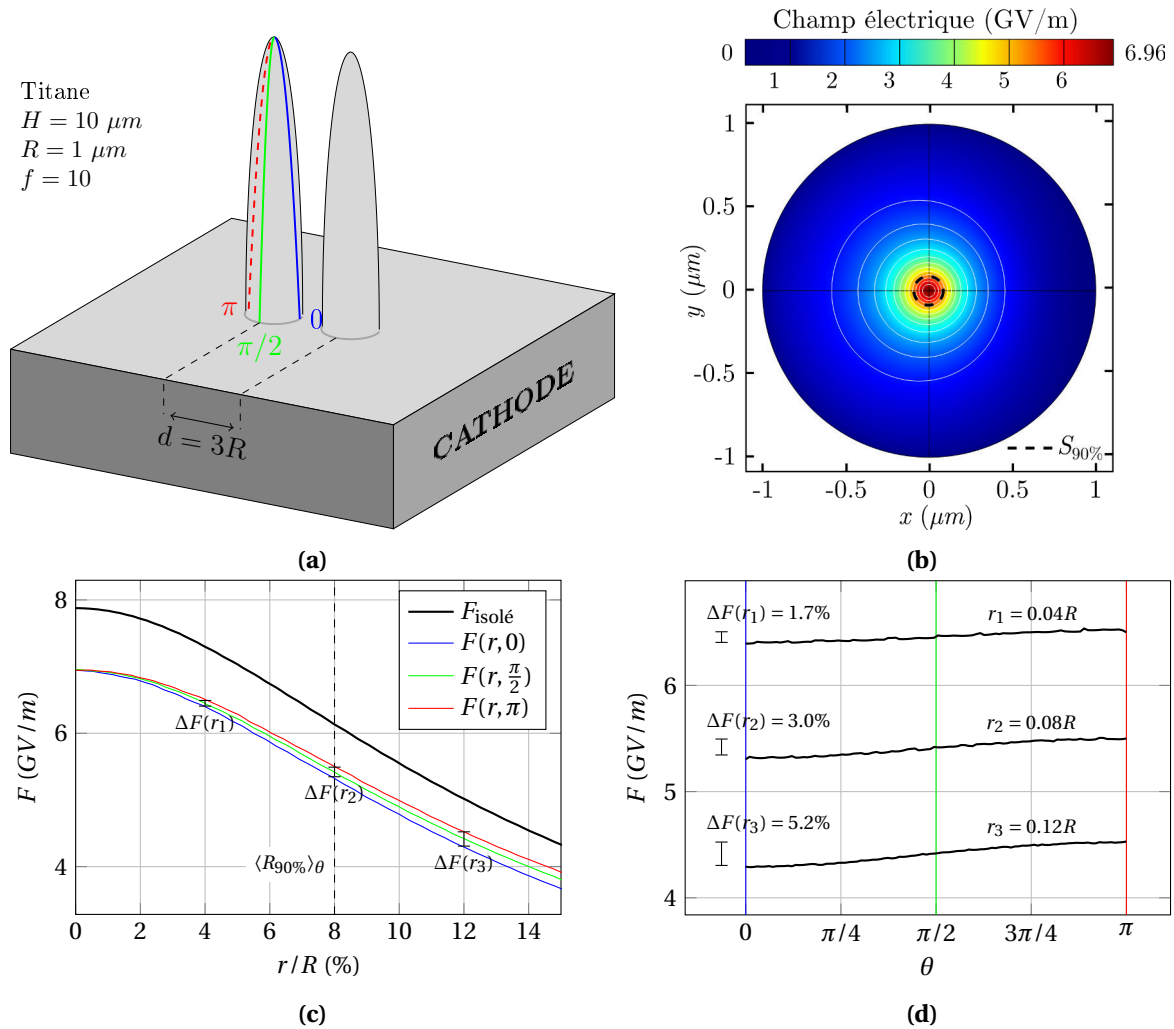


FIGURE 5.1 – Dissymétrie au niveau de la zone d'émission. (a) : Schéma à l'échelle des deux émetteurs identiques ( $H = 10 \mu m$ ,  $f = 10$ ,  $R = 1 \mu m$ ) séparés d'une distance  $d = 3R$ . (b) : Échelle de couleur montrant la distribution de champ électrique au sommet de l'émetteur de gauche dans le plan  $(x, y)$  (vue du dessus). Quelques équipotentielles sont montrées en blanc pour mettre en évidence la perte de symétrie axiale. La ligne noire discontinue indique la surface autour du maximum de champ concentrant 90% de l'émission  $S_{90\%}$ . (c) : Variation du champ  $F$  selon  $r$ . L'angle  $\theta = 0$  correspond à l'axe en face du second émetteur, tandis que l'axe opposé correspond à  $\theta = \pi$ . La ligne noire discontinue indique la valeur du rayon moyen concentrant 90% de l'émission depuis le sommet de l'émetteur  $\langle R_{90\%} \rangle_\theta$ . (d) : Variation du champ  $F$  avec l'angle  $\theta$  à trois valeurs de rayon  $r$  proche du sommet. La perte de champ  $\Delta F$  entre la valeur à  $\theta = \pi$  et celle à  $\theta = 0$  est indiquée en %.



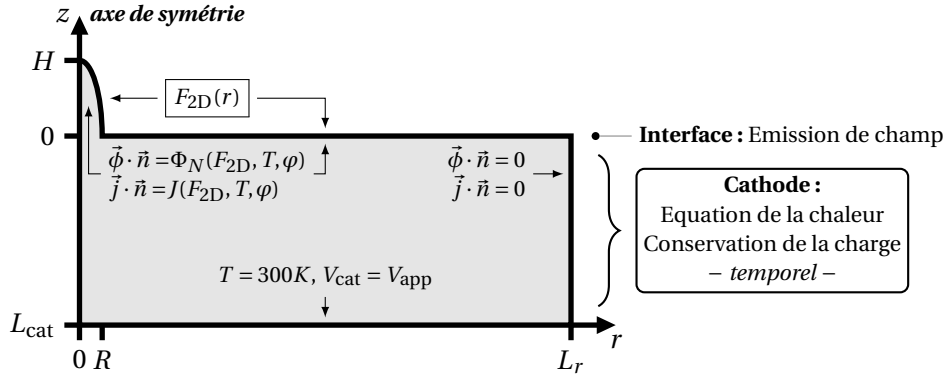


FIGURE 5.2 – Conditions aux limites des simulations 2D axisymétrique évaluant l'impact de la dissymétrie en 3D sur l'autoéchauffement : au lieu de résoudre l'équation de Laplace, la simulation prend en entrée une distribution radiale de champ  $F_{2D}$  obtenue à partir de la distribution du champ en 3D  $F(r, \theta)$ . En conséquence, il n'est plus nécessaire de modéliser l'enceinte.

Pour encadrer l'impact sur le courant de ces variations, on met au point un nouveau type de simulation 2D axisymétrique qui résout l'autoéchauffement en prenant directement en entrée une distribution radiale de champ  $F_{2D}(r)$  le long de l'émetteur au lieu de résoudre l'équation de Laplace. Les conditions aux limites correspondantes sont données sur la figure 5.2. L'idée est alors de construire  $F_{2D}(r)$  à partir de  $F(r, \theta)$  et de comparer en sortie de simulation les valeurs  $I_{2D}$  et  $T_{2D}$  du courant et de la température maximale aux valeurs  $I_{3D}$  et  $T_{3D}$  obtenues en 3D. Pour systématiser la comparaison, on définit l'erreur 3D/2D comme suit :

$$\eta_I = \frac{I_{2D} - I_{3D}}{I_{3D}}, \quad \eta_T = \frac{T_{2D} - T_{3D}}{T_{3D}} \quad (5.1)$$

En prenant  $F_{2D}(r) = F(r, \pi)$  *i.e.* la distribution radiale de champ maximal à  $\theta = \pi$  (*cf.* Fig. 5.1c, courbe rouge) on obtient une borne supérieure de l'erreur : l'émission est surestimée avec une erreur  $\eta_I = +12\%$  et  $\eta_T = +5\%$ . En prenant à l'inverse  $F_{2D}(r) = F(r, 0)$  (*cf.* Fig. 5.1c, courbe bleue) on obtient la borne inférieure avec une erreur  $\eta_I = -13\%$  et  $\eta_T = -6\%$ . On peut résumer la situation comme suit : en modélisant l'échauffement d'un des deux émetteurs en 2D en prenant la distribution radiale  $F_{2D}(r) = F(r, \theta^*)$  le long d'un angle aléatoire  $\theta^*$ , on trouvera la bonne valeur de courant et de température à plus ou moins une dizaine de pourcents.

Une meilleure stratégie consiste alors à donner en entrée de simulation 2D la moyenne orthoradiale du champ 3D :

$$\bar{F}(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(r, \theta) d\theta \quad (5.2)$$

En prenant  $F_{2D} = \bar{F}(r)$ , on obtient en effet un courant et une température identique au pourcent près à celui calculé en 3D :  $\eta_I = +0.12\%$  et  $\eta_T = -0.34\%$  (le tableau 5.1 récapitule les valeurs de courant et de température obtenues pour les différents cas étudiés dans cette section). Cette erreur résiduelle est totalement négligeable puisqu'elle est inférieure à l'écart artificiel que l'on aurait entre deux simulations identiques où l'on aurait simplement généré à nouveau le maillage (*cf.* annexe G). Bien que la dissymétrie soit supprimée en 2D, le champ moyen donne un courant initial très proche et l'émetteur subit ensuite un échauffement similaire.

Émerge alors la possibilité de résoudre uniquement l'électrostatique en 3D, pour simuler ensuite l'autoéchauffement de chaque émetteur de manière indépendante en 2D, à partir de la moyenne orthoradiale du champ. Par souci de concision, nous appellerons désormais ce processus la simplification 3D/2D de nos simulations. Il faut toutefois se garder de généraliser trop vite les performances de cette simplification qui n'a été pour l'instant testée que sur un cas finalement assez peu dissymétrique : les variations orthoradiales du champ dans la zone d'émission n'étaient que de l'ordre

	$I_{2D}$ (mA)	$I_{3D}$ (mA)	$\eta_I$ (%)	$T_{2D}$ (K)	$T_{2D}$ (K)	$\eta_T$ (%)
$F_{2D} = F(r, \pi)$	3.70		+12%	919		+5%
$F_{2D} = F(r, 0)$	2.88	3.295	-13%	820	876	-6%
$F_{2D} = \bar{F}(r)$	3.299		+0.12%	873		-0.34%

TABLE 5.1 – Récapitulatif de l’erreur 3D/2D en fonction de la distribution radiale  $F_{2D}(r)$  donnée en entrée de la simulation 2D axisymétrique (cf. Fig 5.2).

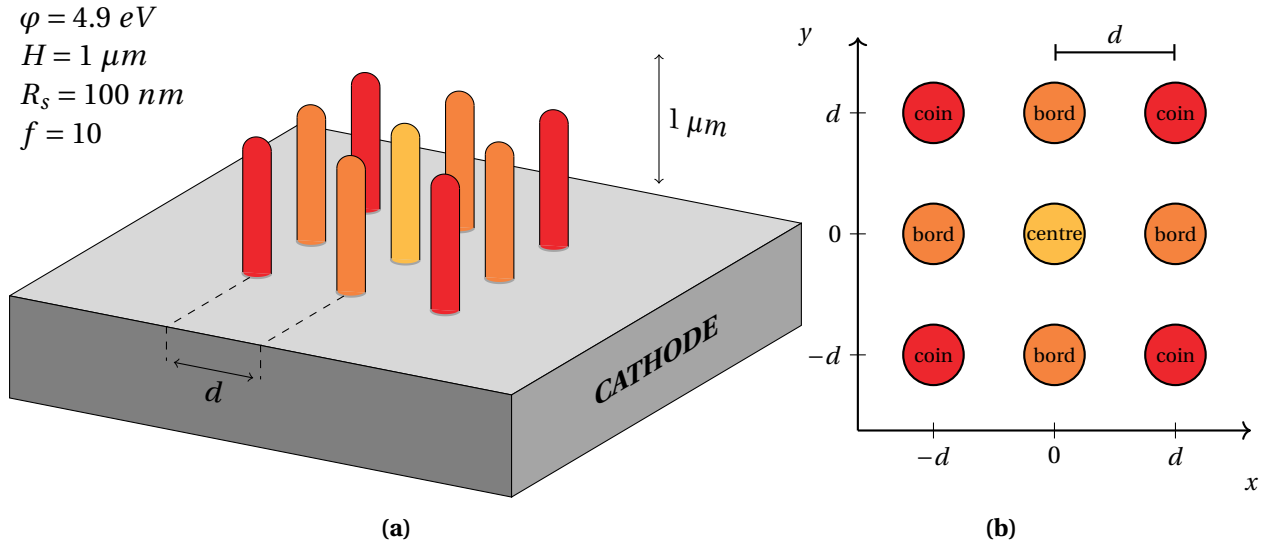


FIGURE 5.3 – Réseau 3 × 3 d’émetteurs sphère-sur-cylindre. (a) : Schéma en 3D. (b) : Schéma vu du dessus. Les couleurs jaune, orange et rouge sont respectivement associés aux émetteurs du centre, des bords et des coins du réseau, comme précisé sur le schéma de droite. Les schémas ne sont pas à l’échelle et l’espace entre les bords du réseau et les faces latérales du domaine de simulation vaut  $10 \times H$  (configuration non périodique).

de quelques pourcents. La dépendance du courant avec le champ n’étant pas linéaire, on peut s’attendre à ce qu’une simple moyenne arithmétique induise une erreur notable pour des dissymétries plus fortes. C’est ce que nous allons montrer dans la section suivante.

### 5.1.2 Erreur en cas de forte dissymétrie

Pour étudier les performances de la simplification 3D/2D dans des cas de forte dissymétrie, il est plus éloquent de se tourner vers une forme d’émetteur sphère-sur-cylindre qui présente de manière générale une zone d’émission plus importante, à l’image des émetteurs hémisphériques dont le facteur d’aspect s’approche de 1. Les géométries sphère-sur-cylindre présentent toutefois l’intérêt de conserver des renforcements de champ plus proche des valeurs typiques mesurées dans les sources d’électrons type FEA. Par ailleurs, ces formes sont généralement utilisées par la communauté pour représenter des émetteurs type nanotubes de carbone, comme en témoigne les nombreuses études électrostatiques menées sur ce genre de géométrie [1, 2, 3].

Considérons alors un réseau 3 × 3 d’émetteurs sphère-sur-cylindre de hauteur  $H = 1 \mu\text{m}$  et de rayon  $R_s = 100 \text{ nm}$ , de sorte que  $f = 10$  (le renforcement de champ au sommet d’un tel émetteur isolé vaut  $\beta = 11.8$ ). L’intérêt de cet arrangement est double. Premièrement, l’amplitude de la dissymétrie peut être contrôlée *via* l’espacement  $d$  du réseau : dissymétrie nulle pour  $d \rightarrow \infty$  et maximale pour  $d = 2R_s$  (contact). Deuxièmement, les neuf émetteurs se rangent en trois catégories de dissymétrie distincte (cf. figure 5.3) : émetteur du centre (en jaune doré), émetteurs des bords (en orange) et émetteurs des coins (en rouge).

Par des arguments de plans de symétrie, on peut avancer que la distribution de champ à la surface

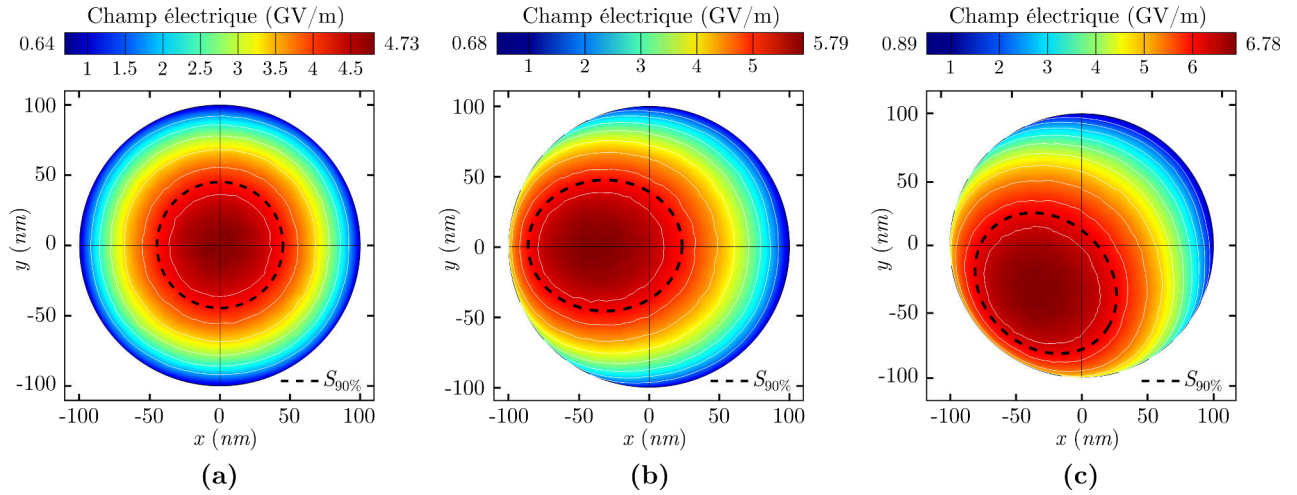


FIGURE 5.4 – Distribution en champ électrique à la surface des émetteurs sphère-sur-cylindre ( $H = 1 \mu\text{m}$  et  $R_s = 100 \text{ nm}$ ) en configuration réseau  $3 \times 3$ , à  $d = 3R_s = 0.3H$  (cf. Fig. 5.3). (a) : émetteur du centre à  $(0,0)$ . (b) : émetteur du bord à  $(-d,0)$ . (c) : émetteur du coin à  $(-d,-d)$ .

des émetteurs des coins sera la plus dissymétrique, tandis que l'émetteur central devrait peu dévier d'une symétrie axiale. La résolution de l'électrostatique en 3D sous un champ électrique global  $E = 0.8 \text{ GV/m}$  permet de confirmer cette intuition géométrique. La figure 5.4 montre les cartes de champ obtenues pour un espacement  $d = 3R_s = 0.3H$ . Par soucis de concision, on choisit de ne présenter les résultats que d'un émetteur de bord et d'un émetteur de coin, choisi arbitrairement.

En comparaison avec le cas à deux émetteurs hémipéloïdes de la sous-section précédente, on voit que la dissymétrie pour les pointes de bord et de coin est bien plus marquée ici, avec une position du champ maximal qui s'écarte très distinctement du sommet de l'émetteur. On peut noter par ailleurs que les émetteurs en coin présentent la plus grande valeur de champ local, ce qui rappelle que l'amplitude de l'écrantage et celle de la dissymétrie ne sont pas corrélées.

Évaluons alors les performances de la simplification 3D/2D en fonction de l'espacement du réseau. Pour ne pas avoir à résoudre l'autoéchauffement en 3D pour chaque valeur d'espacement testé, on se contente ici de comparer le courant par émetteur  $I_{3D}$  à  $300 \text{ K}$  avec le courant  $I_{2D}$  obtenu à partir de la moyenne orthoradiale  $\bar{F}(r)$ . La seule propriété matériaux dont on a besoin est donc le travail de sortie. Pour être en accord avec les valeurs typiques mesurées pour les nanotube de carbone multifeuilletés [4], on fixe  $\varphi = 4.9 \text{ eV}$ . L'erreur que l'on obtient sur le courant à forte dissymétrie est suffisante pour montrer les limites d'une simple moyenne arithmétique. En effet, la figure 5.5 montre qu'à mesure que l'espacement diminue, l'erreur  $\eta_I$  sur le courant augmente, jusqu'à  $-80\%$  pour les coins lorsque les émetteurs sont en contact. Pour l'émetteur central bien plus symétrique en revanche, on voit que cette augmentation est négligeable, de  $\eta_I = -0.2\%$  pour  $d = 2H$  à  $\eta_I = -0.7\%$  pour  $d = 0.2H$ . Ce constat vient confirmer que l'erreur provient bien de la dissymétrie, et non pas de la simple diminution du champ en soi.

Enfin, remarquons que l'erreur est systématiquement négative. Ce résultat est directement relié à la relation convexe de la densité de courant  $J(F)$  avec le champ  $F$  (voir par exemple la figure 2.11a). De ce fait, la moyenne orthoradiale  $\bar{J}(r)$  de la densité de courant à un rayon  $r$  donné sera toujours plus grande que la densité de courant appliqué à la moyenne orthoradiale du champ  $J(\bar{F}(r))$  à ce même rayon<sup>2</sup> :

$$J(\bar{F}) < \bar{J} \quad (5.3)$$

Or, en notant  $\ell$  l'abscisse curviligne le long de l'émetteur, on peut expliciter le courant  $I_{3D}$  et  $I_{2D}$  comme suit :

$$I_{3D} = \int_0^L \int_0^{2\pi} J(r, \theta) r d\theta d\ell = \int_0^L 2\pi r \cdot \bar{J}(r) d\ell \quad (5.4)$$

2. Cette affirmation découle de l'inégalité de Jensen (wikipédia)

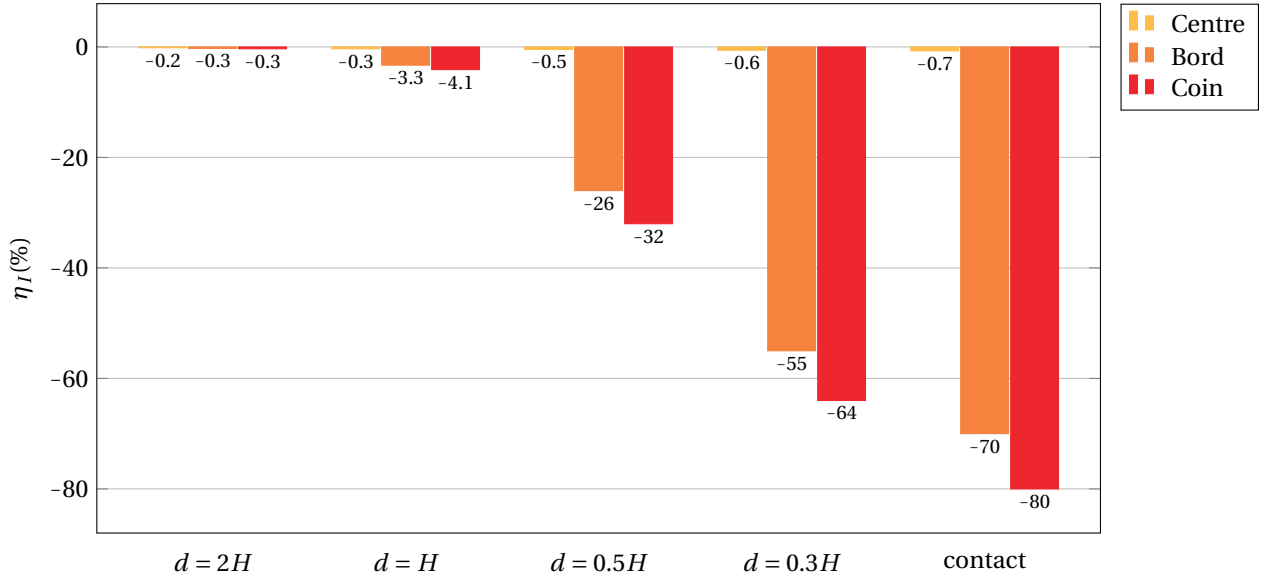


FIGURE 5.5 – Erreur grandissante  $\eta_I$  entre les courants  $I_{2D}$  et  $I_{3D}$  (cf. Eq. 5.1) à mesure que la distance entre les émetteurs diminue, pour la configuration de la figure 5.3. Le courant  $I_{2D}$  est ici calculé à partir de  $\bar{F}(r)$ , une simple moyenne orthoradiale du champ  $F(r, \theta)$ .

$$I_{2D} = \int_0^L 2\pi r \cdot J(\bar{F}(r)) d\ell \quad (5.5)$$

En combinant les trois dernières équations, il ressort que  $I_{2D} < I_{3D}$  et par conséquent  $\eta_I < 0$ .

C'est en fait la relation fortement non linéaire de la densité de courant émise avec le champ qui limite les performances d'une simple moyenne arithmétique du champ en cas de forte dissymétrie. Pour améliorer la simplification 3D/2D, il faudrait en fait pouvoir trouver la distribution radiale de champ qui donne un courant  $I_{2D}$  identique à  $I_{3D}$ . Nous développons dans la section suivante une méthode qui permet de simplement de s'en approcher.

## 5.2 Méthode de réduction 3D vers $N \times 2D$

L'intérêt d'une simplification 3D/2D est immédiat : la possibilité de prédire sans erreur l'auto-échauffement de  $N$  émetteurs à situés à proximité les uns des autres par  $N$  résolutions 2D axisymétriques plutôt qu'un seul calcul 3D difficilement parallélisable et bien plus gourmand en temps et puissance de calcul. Rappelons par ailleurs que la modélisation de l'auto-échauffement d'un émetteur à effet de champ permet à la fois de déterminer la contribution thermique au courant et son champ de préclaquage. Il faut toutefois noter que cette simplification, si elle est démontrée, s'applique uniquement aux émetteurs axisymétriques qui peuvent être décrits par une modélisation 2D.

Comme déjà précisé, les deux limites de la simplification 3D/2D sont le couplage thermique entre émetteurs et l'erreur induite par le choix d'une distribution radiale de champ (perte de l'information orthoradiale). On a montré au chapitre précédent que négliger le couplage thermique pourrait au pire induire une erreur d'une dizaine de pourcents (dans des configurations bien spécifiques) ce qui reste raisonnable. On vient en revanche de voir dans la section précédente que l'intuition initiale d'utiliser la moyenne orthoradiale pour définir le champ 2D pouvait induire des erreurs de plusieurs dizaines de pourcents.

Pour améliorer la fiabilité de la simplification 3D/2D et prédire de la manière la plus précise possible l'auto-échauffement via une simulation 2D, le plus important est en fait de trouver le champ  $F_{2D}$  donnant un courant  $I_{2D}$  le plus proche possible du courant 3D ( $I_{3D}$ ). Nous développons dans cette section une méthode analytique pour déterminer ce champ, évaluons ensuite ses performances sur

le cas précédent, et présentons enfin l'intégration de la simplification 3D/2D dans notre algorithme de simulation.

### 5.2.1 Détail mathématique

Pour prendre en compte l'influence de la dissymétrie du champ  $F(r, \theta)$  sur le courant, il suffit d'effectuer directement la moyenne orthoradiale sur la densité de courant émise  $J(r, \theta)$ . On ne peut en revanche pas donner cette densité de courant moyennée  $\bar{J}(r)$  en entrée de simulation 2D puisque l'on aurait alors aucun moyen de mettre à jour l'émission avec la montée en température. La difficulté est donc de trouver ensuite un moyen efficace pour remonter au champ  $F_{2D}(r)$  qui serait à l'origine de cette densité de courant moyennée.

Dans les simulations 3D, le courant s'écrit sous la forme :

$$I_{3D} = \iint_S J(F_{3D}, T) dS = \int_0^L \int_0^{2\pi} J(r, \theta) d\ell r d\theta = \int_0^R \int_0^{2\pi} rC(r) \cdot J(r, \theta) dr d\theta \quad (5.6)$$

où  $F_{3D}$  est la solution de l'équation de Laplace à la surface d'un émetteur donné. Ce champ prend en compte toutes les interactions électrostatiques liées aux autres émetteurs à proximité et dépend donc de  $r(z)$  et de  $\theta$  (système de coordonnées cylindriques attaché à chaque pointe).  $C(r) = d\ell/dr$  est le jacobien de l'abscisse curviligne  $\ell(r)$  pour la forme d'émetteur considérée (cf. Eq. 2.40 et 2.48).

En simulation 2D, en revanche, la dépendance en  $\theta$  disparaît et on a donc :

$$I_{2D} = \int_0^L J(F_{2D}, T) d\ell = \int_0^R 2\pi rC(r) \cdot J(r) dr \quad (5.7)$$

Avec  $F_{2D}$  le champ local à la surface d'une pointe en 2D, dépendant uniquement de  $r$ .

L'erreur sur le courant avec  $I_{2D}$  par rapport à  $I_{3D}$  (liée à la perte de la dépendance en  $\theta$  du champ) peut donc s'évaluer analytiquement comme :

$$\eta_I \propto I_{3D} - I_{2D} = \int_0^R rC(r) \left[ \int_0^{2\pi} J(F_{3D}, T) d\theta - 2\pi J(F_{2D}, T) \right] dr \quad (5.8)$$

Pour minimiser l'erreur sur le courant entre le 2D et le 3D ( $\eta_I = 0$ ), il faut donc avoir :

$$J(F_{2D}, T) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} J(F_{3D}, T) d\theta = \bar{J}(F_{3D}, T) \quad (5.9)$$

où  $\bar{J}$  dénote la moyenne orthoradiale de la densité de courant. Ainsi, il faut trouver  $F_{2D}$  tel que  $J(F_{2D}) = \bar{J}(F_{3D})$ .

Au temps initial  $t = 0$ , les émetteurs sont supposés être à température ambiante ( $T \sim 300$  K). En utilisant la formule analytique de Murphy et Good  $J = AF^2 \exp(-C_2 \varphi^{3/2} v_0 / F)$  avec l'approximation de Spindt des fonctions elliptiques (cf. Eq. E.7 et E.8), on peut traduire l'équation 5.9 en une équation sur le champ  $F_{2D}$  :

$$F_{2D}^2 \exp(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F_{2D}} v_0) = \frac{\bar{J}(F_{3D})}{A} \quad (5.10)$$

En calculant numériquement  $\bar{J}(F_{3D})$  à partir de la connaissance de  $F_{3D}$  on peut poser :

$$C := \frac{\bar{J}(F_{3D})}{A} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F_{3D}^2 \exp(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F_{3D}} v_0) d\theta \quad (5.11)$$

Et enfin résoudre analytiquement l'équation 5.10 en utilisant la fonction  $\mathcal{W}$  de Lambert (le détail du calcul est relégué à l'annexe I) :

$$F_{2D} = \frac{B}{2\mathcal{W}\left(\frac{B}{2\sqrt{C}}\right)} \quad (5.12)$$

où

$$B = C_2\varphi^{3/2}v_0 = \frac{4\sqrt{2m\phi^3}}{3\hbar e} \times 0.95 = 10.3 \text{ GV/m} \quad (5.13)$$

Rappelons que la fonction de Lambert  $\mathcal{W}(z)$  est définie comme la solution à l'équation  $xe^x = z$  ([wikipédia](#)).

### 5.2.2 Application en forte dissymétrie

Ainsi, à partir de n'importe quelle distribution de champ 3D  $F(r, \theta)$  à la surface d'un émetteur nous avons une méthode qui permet de trouver la distribution radiale de champ  $F_{2D}(r)$  qui minimise au mieux l'erreur sur le courant  $\eta_I$ .

Appliquons cette méthode au cas précédent du réseau  $3 \times 3$  d'émetteurs sphère-sur-cylindre (Fig. 5.3). La figure 5.6 montre la variation de l'erreur  $\eta_I$  avec la diminution de l'espacement  $d$ . Les performances sont alors bien meilleurs dans toutes les configurations. Dans le pire des cas, lorsque les émetteurs sont en contact, on atteint seulement  $\eta_I = +2.5\%$  pour les pointes des coins, là où la moyenne sur le champ donnait une erreur de  $-80\%$ . Par ailleurs, on voit à nouveau que cette erreur provient de la dissymétrie : l'erreur sur les émetteurs des coins est systématiquement supérieure à celle sur les bords et l'erreur sur l'émetteur centrale reste négligeable quel que soit l'espacement.

L'erreur résiduelle dans les cas de forte dissymétrie est certainement due au léger écart de la dépendance  $J(F)$  entre l'équation de Fowler Nordheim choisie et notre calcul numérique plus précis (cf. Fig. E.1). Une imprécision dans le calcul numérique de la moyenne orthoradiale peut aussi participer pour une partie de l'erreur, en particulier lorsque le maillage 3D est peu précis. Dans l'ensemble, une erreur de quelques pourcents dans les pires cas est tout à fait acceptable puisqu'on ne cherche pas à quantifier précisément des grandeurs absolues, mais plutôt à déterminer les tendances relatives des phénomènes physiques.

Ainsi, en prenant en compte la dépendance non linéaire de  $J$  avec le champ  $F$ , la moyenne orthoradiale sur la densité de courant permet de traduire l'émission de chaque émetteur d'une lourde simulation 3D vers une simulation 2D sans perte notable sur l'amplitude du courant émis. Bien que la distribution locale de densité de courant sera différente entre le 3D et le 2D, il est physiquement raisonnable d'espérer qu'un courant initial identique mène à un échauffement très similaire. C'est ce que nous évaluerons dans la dernière section de ce chapitre, après avoir précisé l'intégration de la simplification 3D/2D dans notre algorithme de simulation.

### 5.2.3 Intégration de la simplification 3D vers $N \times 2D$ dans notre algorithme de simulation

Pour des arrangements d'émetteurs identiques particulièrement réguliers, comme deux émetteurs se faisant face ou un réseau d'émetteurs infini, on peut mettre à profit les plans de symétrie pour réduire le domaine de simulation. En limitant ainsi le nombre de mailles, la puissance de calcul requise pour résoudre l'auto-échauffement en 3D reste raisonnable, et le temps de calcul est de l'ordre de l'heure pour une station de travail actuelle (32 Go de RAM).

Pour modéliser un grand nombre d'émetteurs différents (simulant par exemple la statistique de croissance de nanostructures ou une distribution irrégulière d'aspérité de surface), le nombre d'éléments du maillage croît très fortement et avec, la taille des matrices sur lesquelles opèrent les solveurs numériques. Si une résolution stationnaire reste possible en 3D pour un nombre raisonnable d'émetteurs, une résolution temporelle requiert en plus le stockage en mémoire vive de la solution au temps précédent, ce qui accroît d'autant la puissance de calcul requise (sans parler du temps de calcul bien plus élevé si l'on veut conserver un pas de temps suffisamment raffiné). Ce temps de calcul apparaît d'autant plus onéreux que l'intérêt principal de la modélisation thermique réside plus dans le calcul

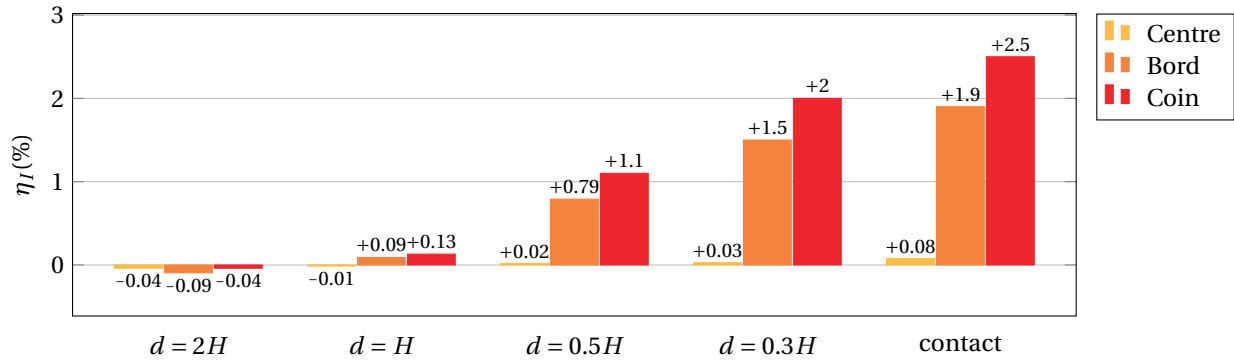


FIGURE 5.6 – Erreur  $\eta_I$  entre les courants  $I_{2D}$  et  $I_{3D}$  (cf. Eq. 5.1) à mesure que la distance entre les émetteurs diminue, pour la configuration de la figure 5.3. Le courant  $I_{2D}$  est ici calculé à partir d'un champ  $F_{2D}$  déterminé par l'équation 5.12 après avoir calculé la moyenne orthoradiale  $\bar{J}(r)$  de la densité de courant  $J(r, \theta)$ .

de grandeurs globales – comme la température maximale et la contribution thermique au courant – que dans la connaissance précise des distributions locales. C'est d'ailleurs très certainement la raison pour laquelle la majorité des travaux sur la modélisation de l'auto-échauffement d'émetteur à effet de champ a été jusqu'ici limitée à des études 2D axisymétrique.

Pour pallier cette difficulté et pouvoir traiter des arrangements d'un grand nombre d'émetteurs différents, l'intégration de la simplification 3D/2D à notre algorithme de simulation apparaît comme une solution viable. Ainsi, on remplace l'algorithme de simulation présenté en fin de chapitre 2 (cf. Fig. 2.21) par la procédure 3D/2D qui suit :

- On commence par résoudre l'équation de Laplace dans l'enceinte en 3D pour une distribution donnée de  $N$  émetteurs à la surface de la cathode.
- On échantillonne ensuite la densité de courant  $J(r, \theta)$  à la surface de l'émetteur pour déterminer sa moyenne orthoradiale à chaque valeur de rayon  $r$ . À partir de la valeur de  $\bar{J}(r)$ , on déduit la distribution radiale de champ  $F_{2D}(r)$  en utilisant l'équation 5.12.
- On résout enfin pour chacun des  $N$  émetteurs les équations couplées de la chaleur et du courant en géométrie 2D axisymétrique, à partir de la distribution radiale de champ  $F_{2D}(r)$ .

La figure 5.7 récapitule ces différentes étapes. On passe ainsi d'une simulation temporelle 3D très lourde en temps et puissance de calcul, à un enchaînement d'une simulation 3D stationnaire suivi de  $N$  simulations temporelles 2D axisymétriques bien moins exigeantes. En procédant ainsi, on gagne un facteur 10 à 100 dans le temps de calcul, qui pourrait éventuellement être accentué davantage en parallélisant la résolution des  $N$  simulations 2D.

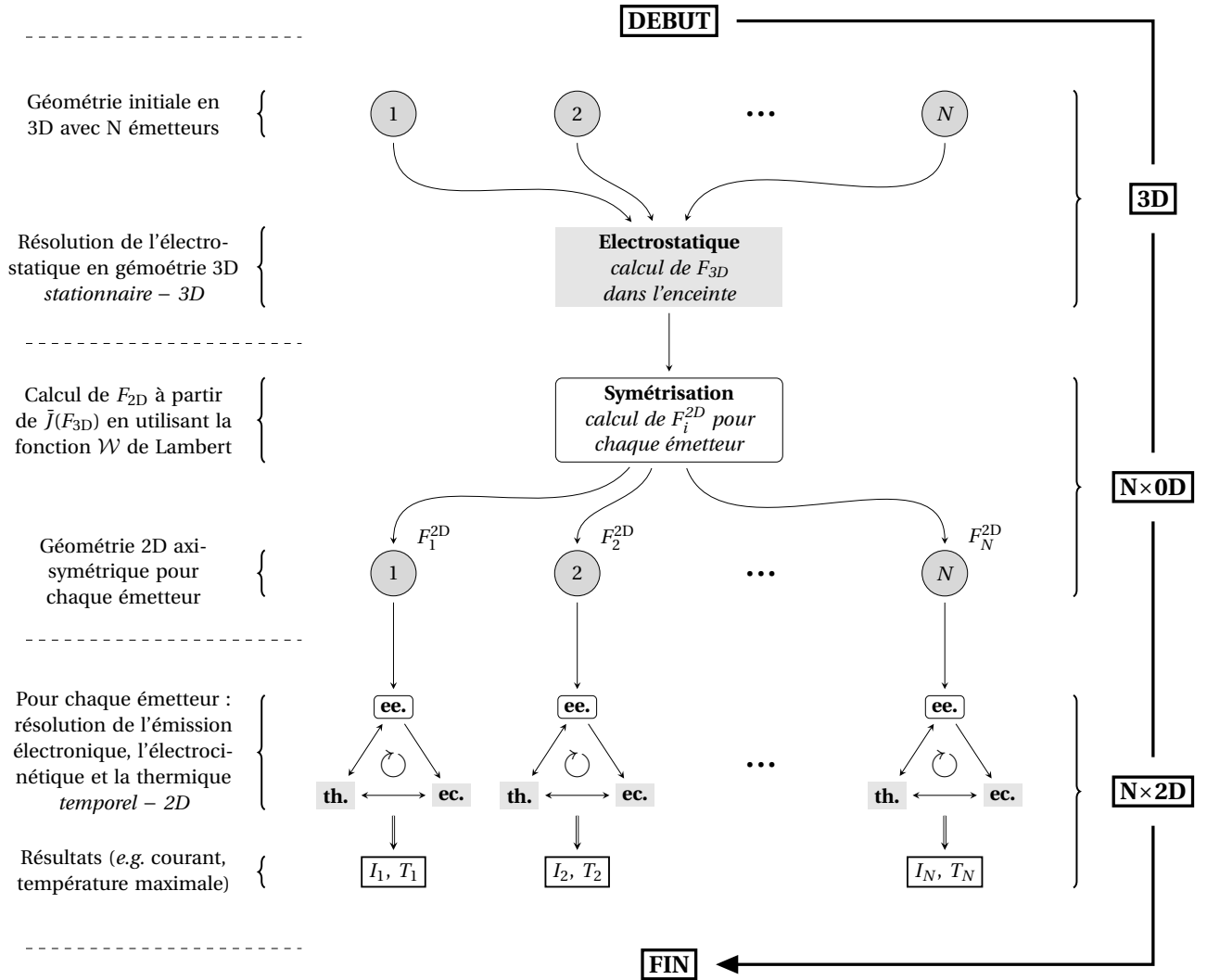


FIGURE 5.7 – Diagramme récapitulatif de l’algorithme de modélisation intégrant la simplification 3D/2D (à comparer au diagramme de la figure 2.21). On passe ainsi d’une simulation 3D temporelle à un enchaînement d’une simulation 3D stationnaire suivi de  $N$  simulations temporelles 2D axisymétriques. Les acronymes **ee.**, **th.** et **ec.** désigne respectivement la résolution de l’émission électronique, de la thermique, et de l’électrocinétique.



### 5.3 Performance pour la prédiction de l'auto-échauffement d'un réseau d'émetteurs sphère-sur-cône

Un champ d'application tout désigné pour notre algorithme 3D/2D est la modélisation de l'émission de sources d'électrons type FEA, basée sur des réseaux d'émetteurs micro/nanométrique. Les conditions de croissance de ces émetteurs au cours de la fabrication de la source donne lieu à des fluctuations dans la géométrie des émetteurs. Diverses techniques de croissance de nanostructures sur une surface existe, mais aucune ne permet une reproductibilité parfaite. L'enjeu ici est donc de pouvoir prendre en compte l'écrantage dans les performances d'émission tout en étant capable de déterminer le champ de claquage individuel des émetteurs, tous légèrement différents. Pour reproduire la statistique de croissance, il faut modéliser un grand nombre d'émetteurs ce qui rend très lourd une modélisation thermique en 3D. Pour ce type de modélisation, notre algorithme 3D/2D apparaît bien plus adapté. Le dernier chapitre de cette thèse est justement consacré à l'application de cet algorithme à une source type FEA en développement, basé sur des nanostructures de carbone de géométrie sphère-sur-cône. Avant d'entrer dans le vif du sujet, nous achevons le chapitre actuel sur une vérification des performances de notre algorithme 3D/2D en présence d'un fort échauffement.

Considérons alors un dernier modèle-jouet qui se rapproche de notre prochain sujet d'étude : un réseau  $3 \times 3$  d'émetteurs sphère-sur-cône identiques avec une hauteur  $H = 5 \mu m$ , un rayon de sphère  $R_s = 50 nm$  et un angle de cône  $\alpha = 1^\circ$  (cf. Fig. 5.8). La résolution de l'auto-échauffement en 3D sur ce modèle est toujours possible avec une puissance de calcul raisonnable, mais prend plusieurs heures par simulation. On limite donc l'évaluation des performances à un cas limite : l'émission dans les conditions de préclaquage.

Toutefois, pour un travail de sortie  $\varphi = 4.9 eV$  [4] et des propriétés matériaux type graphite (se rapprochant de celles des nanostructures de carbone, cf. annexe H), le champ de préclaquage est conditionné par l'emballement de l'effet Joule, comme on le verra dans le prochain chapitre. La température maximale atteignable en régime permanent ne dépasse pas  $2000 K$ . Par conséquent, et pour pouvoir évaluer l'erreur 3D/2D à plus haute température, nous utilisons les propriétés matériaux du tantale, qui avaient été trouvés au chapitre 3 moins propice à l'emballement résistif (le travail de sortie est toutefois conservé à  $4.9 eV$ ).

On parvient alors, par le biais d'une dichotomie, à déterminer le champ de préclaquage d'un émetteur isolé : un champ global  $E_{pb} = 0.9 GV/m$  menant à la température de fusion du tantale,  $T_F = 3300 K$ . Le renforcement de champ de l'émetteur isolé étant  $\beta = 75$ , le champ local menant au préclaquage vaut  $F_{pb} = 7 GV/m$  au sommet.

Dans le cas du réseau  $3 \times 3$  en revanche, à cause de l'écrantage, le champ appliqué doit être adapté pour chaque valeur d'espacement afin de retrouver un champ local similaire. Autre effet de l'écran-

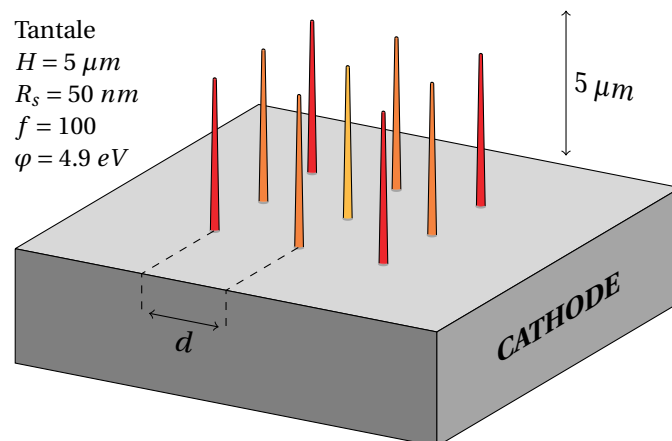


FIGURE 5.8 – Schéma du modèle-jouet choisi pour éprouver les performances de l'algorithme 3D/2D en présence d'un échauffement.

tage, la température de fusion sera atteinte en premier par les émetteurs les moins écartés, ceux des coins. Ainsi, pour traduire la valeur de  $E_{pb} = 0.9GV/m$  au cas du réseau, on doit dans un premier temps déterminer le renforcement de champ  $\beta(d)$  au sommet des émetteurs des coins pour chaque valeur d'espacement considéré. On peut ensuite pour chaque distance  $d$  modéliser l'échauffement en 3D en adaptant le champ appliqué de sorte que le champ local  $F$  soit constant au sommet des émetteurs des coins :  $F_{pb} = \beta E_{pb} = \beta(d)E(d)$ . Les valeurs trouvées sont données dans le tableau 5.3. Les émetteurs des coins atteignent ainsi une température maximale  $T_{3D}$  de l'ordre de 3300 K, tandis que celle des émetteurs des bords et du centre diminuent à mesure que l'espacement se réduit.

Une fois cette première série de simulations terminée, on détermine pour chaque espacement et chaque émetteur le champ  $F_{2D}$  via l'équation 5.12. À partir de ces distributions radiales de champ, on résout indépendamment pour chaque émetteur – seulement un émetteur de bord et un émetteur de coin – l'échauffement en 2D (algorithme 3D/2D). Les erreurs sur le courant et la température pour chaque catégorie d'émetteur (centre, bord, coin) sont présentées sur la figure 5.9. On y différencie l'erreur sur le courant à 300 K :

$$\eta_I(300\text{ K}) = \frac{I_{2D}(300\text{ K}) - I_{3D}(300\text{ K})}{I_{3D}(300\text{ K})} \quad (5.14)$$

de l'erreur sur le courant avec prise en compte de la contribution thermique :

$$\eta_I(T) = \frac{I_{2D}(T) - I_{3D}(T)}{I_{3D}(T)} \quad (5.15)$$

Concentrons dans un premier temps notre analyse sur le comportement de l'erreur 3D/2D. L'erreur sur le courant  $I(300\text{ K})$  présente une variation très similaire à celle observée dans le modèle-jouet de la section précédente : l'erreur est positive et s'accroît avec la dissymétrie (Fig. 5.9a). Plus étonnant en revanche, l'erreur sur le courant  $I(T)$  est, elle, négative dans la plus part des cas (Fig. 5.9b).

Pour comprendre pourquoi, il faut d'abord analyser le graphique 5.9c de l'erreur sur la température maximale :

$$\eta_T = \frac{T_{2D} - T_{3D}}{T_{3D}} \quad (5.16)$$

On y voit une erreur systématiquement négative et, plus remarquable encore, maximale pour l'émetteur centrale (le moins dissymétrique). En fait, ce résultat est la signature d'un couplage thermique. La chaleur dissipée par les émetteurs des coins cause une montée en température de la cathode à la base des émetteurs, ce qui réduit l'efficacité de l'évacuation thermique des autres émetteurs. À courant initial  $I(300\text{ K})$  identique, la température de l'émetteur central va ainsi monter plus haut en 3D qu'en 2D, puisque la résolution indépendante de l'échauffement en 2D supprime le couplage thermique. De ce fait, la température prédite en 2D est plus faible, et l'erreur  $\eta_T$  est négative. Par ailleurs, avec une température plus faible le courant  $I_{2D}(T)$  est lui aussi prédit plus faible ce qui explique pourquoi  $\eta_I(T)$  tend globalement vers des valeurs négatives comparé à l'erreur  $\eta_I(300\text{ K})$  : sans couplage thermique, on perd une petite contribution thermique au courant, et ce pour les trois catégories d'émetteurs.

Si l'on s'intéresse maintenant plus directement à l'amplitude des erreurs, les graphiques de la figure 5.9 livrent deux conclusions. Premièrement, le couplage thermique est bien la principale limitation aux performances de la simplification 3D/2D puisque, comme espéré, l'utilisation de l'équation 5.12 pour déterminer le champ  $F_{2D}$  est très efficace pour minimiser l'erreur sur le courant. Deuxièmement, cette limitation apparaît très acceptable. Les résultats obtenus ici sur  $\eta_T$  viennent conforter pour une nouvelle géométrie d'émetteur la conclusion du chapitre précédent : La contribution du couplage thermique à l'émission est négligeable dans la plupart des cas et ne semble pas pouvoir excéder la dizaine de pourcents dans les configurations qui lui sont le plus favorables.

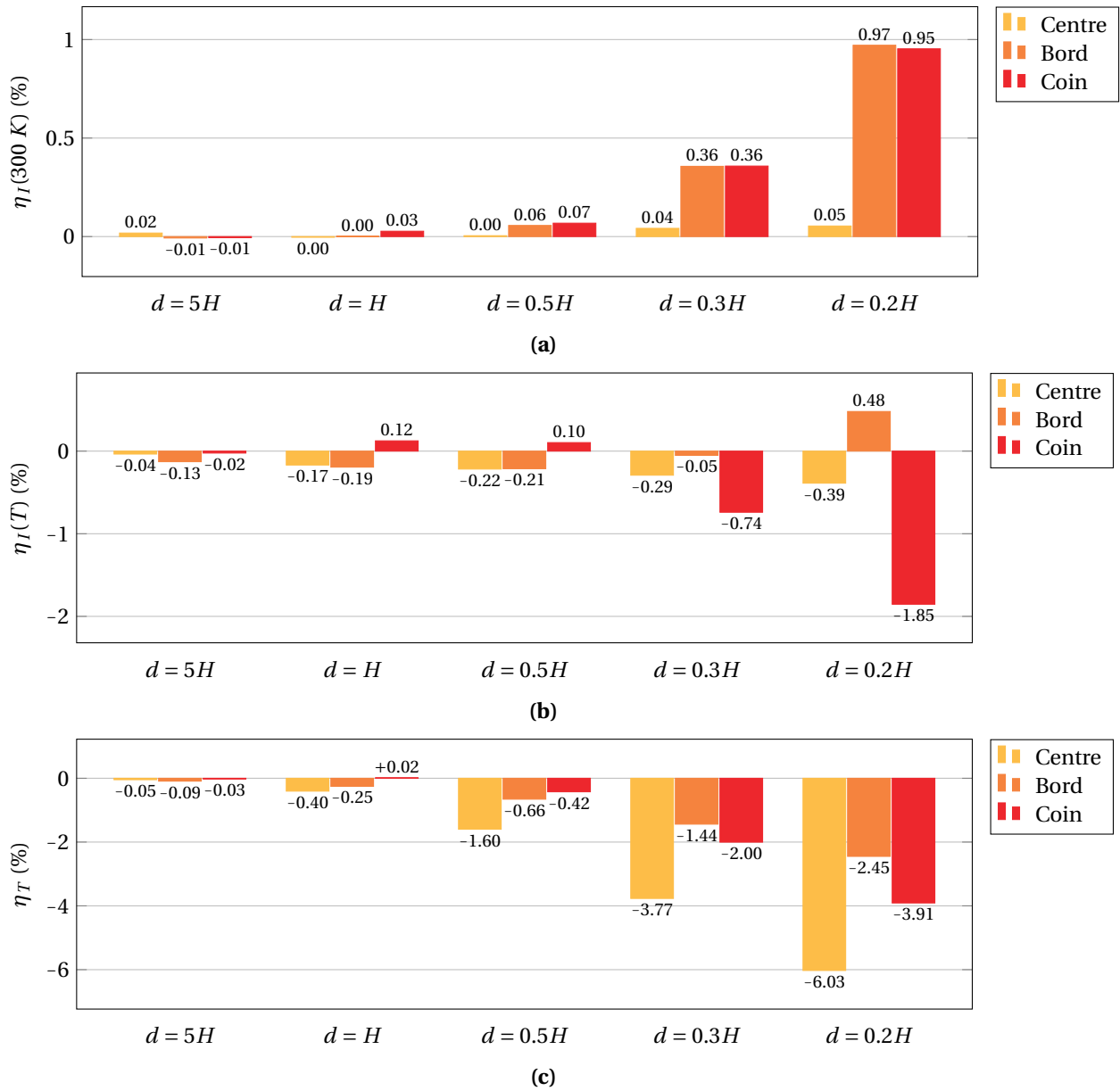


FIGURE 5.9 – Variation de l'erreur 3D/2D avec la réduction de l'espacement du réseau (*cf.* schéma Fig. 5.8). **(a)** : Erreur sur le courant initial  $I(300\text{ K})$  (Eq. 5.14). **(b)** : Erreur sur le courant avec contribution thermique  $I(T)$  (Eq. 5.15). **(c)** : Erreur sur la température maximale atteinte (Eq. 5.16).

d	5H	H	0.5H	0.3H	0.2H
$\beta$ (coin)	75	70	61	55	51
$E$ (global)	93 MV/m	100 MV/m	115 MV/m	127 MV/m	137 MV/m
$F_{pb}$ (coin)	~ 7GV/m				
Courant initial $I(300 K)$ , en mA					
$I_{3D}$ (coin)	1.93	1.83	1.81	1.83	1.74
$I_{3D}$ (bord)	1.90	1.30	0.83	0.62	0.46
$I_{3D}$ (centre)	1.88	0.82	0.29	0.13	0.07
Courant avec contribution thermique $I(T)$ , en mA					
$I_{3D}$ (coin)	5.50	5.05	4.95	5.19	4.86
$I_{3D}$ (bord)	5.34	1.88	1.00	0.71	0.51
$I_{3D}$ (centre)	5.24	0.98	0.30	0.14	0.07
Température maximale atteinte, en K					
$T_{3D}$ (coin)	3380	3288	3306	3440	3406
$T_{3D}$ (bord)	3346	1442	1038	863	730
$T_{3D}$ (centre)	3323	1022	556	423	369

TABLE 5.3 – Tableau des données complémentaires de la figure 5.9. Les grandeurs des simulations 2D peuvent être déduites des grandeurs 3D en combinaison avec les valeurs de l’erreur 3D/2D.

## 5.4 Conclusion

À travers plusieurs études de cas, ce chapitre a abordé la possibilité pour une multitude d’émetteurs à proximité les uns des autres, de résoudre uniquement l’électrostatique en 3D, tout en se contentant ensuite d’une résolution indépendante de l’autoéchauffement en 2D axisymétrique pour chaque émetteur. La résolution temporelle des équations couplées de la chaleur et de la conservation de la charge étant beaucoup plus exigeante en puissance de calcul que la résolution stationnaire de l’équation de Laplace, l’intérêt de ce processus réside dans une évaluation de l’autoéchauffement bien plus aisée, tout en conservant la prise en compte absolument nécessaire de l’écrantage.

L’obstacle principal à cette simplification 3D vers  $N \times 2D$  pour la résolution de l’autoéchauffement est la dissymétrie induite par l’écrantage entre les émetteurs, que l’on observe à partir de la résolution 3D de l’électrostatique. Nous avons montré que la méthode la plus efficace était alors de déterminer pour chaque émetteur la distribution radiale de champ  $F_{2D}(r)$  donnant exactement le même courant à 300 K que la distribution de champ 3D  $F_{3D}(r, \theta)$ . En utilisant la formule analytique de Murphy et Good pour la densité de courant, cette distribution radiale de champ  $F_{2D}(r)$  peut directement être calculée à partir de la moyenne orthoradiale de la densité de courant à 300 K. On obtient ainsi une méthode efficace pour réduire la distribution de champ 3D à la surface d’un émetteur en une distribution radiale à donner en entrée d’une résolution 2D axisymétrique de l’autoéchauffement. L’erreur induite par la dissymétrie avec cette réduction optimisée 3D vers 2D a été montrée inférieure à un pour cent pour des configurations maximisant la dissymétrie.

La seule limitation est alors le couplage thermique, qui peut provoquer une erreur de plusieurs pourcents lorsque des émetteurs quasiment au contact atteignent des températures de plusieurs milliers de Kelvin. En restant consciemment en dehors des cas spécifiques où le couplage thermique est responsable d’une légère contribution au courant, nous pouvons donc efficacement utiliser la méthode de simplification 3D vers  $N \times 2D$  pour simuler l’autoéchauffement d’un grand nombre d’émetteurs, tous différents. Cette méthode est mise à profit dans le chapitre suivant pour étudier les caractéristiques de l’émission par effet de champ d’une source d’électrons type FEA basée sur un réseau de nanostructures de carbone.

## Références du chapitre 5

« La connaissance est une navigation dans un océan d'incertitudes à travers des archipels de certitudes. »

– Edgar Morin

( Les sept savoirs nécessaires à l'éducation du futur, 1999)

- [1] Dohyung KIM, Jean-Eric BOURÉE et Sang Youl KIM. « Calculation of the Field Enhancement for a Nanotube Array and Its Emission Properties ». In : *Journal of Applied Physics* 105.8 (avr. 2009), p. 084315. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.3091282](https://doi.org/10.1063/1.3091282) (cf. p. 129).
- [2] Dan CAI et Lie LIU. « The Screening Effects of Carbon Nanotube Arrays and Its Field Emission Optimum Density ». en. In : *AIP Advances* 3.12 (déc. 2013), p. 122103. ISSN : 2158-3226. DOI : [10.1063/1.4841275](https://doi.org/10.1063/1.4841275) (cf. p. 129).
- [3] Thiago A. DE ASSIS, Fernando E. DALL'AGNOL et Marc CAHAY. « Universal Trade-off between Proximity and Aspect-Ratio in Optimizing the Field Enhancement Factor of Large Area Field Emitters ». en. In : *Applied Physics Letters* 116.20 (mai 2020), p. 203103. ISSN : 0003-6951, 1077-3118. DOI : [10.1063/5.0010140](https://doi.org/10.1063/5.0010140) (cf. p. 129).
- [4] Masashi SHIRAISHI et Masafumi ATA. « Work Function of Carbon Nanotubes ». In : *Carbon* 39.12 (oct. 2001), p. 1913-1917. ISSN : 0008-6223. DOI : [10.1016/S0008-6223\(00\)00322-5](https://doi.org/10.1016/S0008-6223(00)00322-5) (cf. p. 130, 136).

## Chapitre 6

# Application aux sources d'électrons : émission de champ depuis un réseau de nanostructures de carbone

*« Je crois que les théories ont la priorité sur les observations aussi bien que sur les expérimentations, en ce sens que ces dernières n'ont de signification qu'en relation à des problèmes théoriques. »*

---

Karl Popper  
(Misère de l'historicisme – 1956)

### Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Source Thales, statistique de croissance et modèle</b>	<b>142</b>
<b>6.2</b>	<b>Autoéchauffement d'un émetteur typique</b>	<b>145</b>
<b>6.3</b>	<b>Effet de la statistique de croissance sur la performance de l'émission</b>	<b>152</b>
6.3.1	Statistique de croissance et échantillonnage	152
6.3.2	Accroissement de la dispersion avec la densification du réseau	154
6.3.3	Intérêt de la reproductibilité des émetteurs	160
<b>6.4</b>	<b>Conclusion</b>	<b>162</b>

---

Les sources d'électrons basées sur des réseaux d'émetteurs font généralement face à deux défis majeurs : la question de l'espacement du réseau pour optimiser l'émission et la difficulté de produire des émetteurs aux propriétés identiques (*cf.* [1], table 1).

Dans le cadre d'une collaboration avec Thales [2] initiée au cours de cette thèse, nous avons proposé d'appliquer notre modèle d'émission électronique à un projet de source en développement, que nous appellerons par souci de concision *source Thales*. Au début des années 2000 [3], le groupe recherche et technologie de Thales en partenariat avec le département ingénierie de l'université de Cambridge s'est en effet intéressé à l'émission par effet de champ d'une assemblée de nanostructures de carbone élaborées par dépôt chimique en phase vapeur assistée par plasma – PECVD en anglais pour *Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition* – dans l'optique de développer une source d'électrons performante pour diverses applications [4, 5, 6]. Le dispositif a depuis été l'objet de nombreuses études expérimentales, offrant une solide base de données pour sa modélisation [7, 8, 9].

L'idée de la collaboration est de mettre à profit le processus de simplification 3D/2D présenté au chapitre 5 pour apporter un éclairage théorique aux deux défis mentionnés – l'optimisation de l'espacement du réseau et l'impact de la statistique de croissance des émetteurs – avec pour la première fois la considération simultanée de l'écrantage et de l'autoéchauffement. En effet, bien que de nombreuses études se soient penchées sur le problème de l'écrantage électrostatique dans des réseaux de

sphère sur cylindre en 3D [10, 11, 12, 13, 14, 15], la modélisation thermique des nanostructures de carbone a toujours été restreinte à des émetteurs isolés en géométrie 1D ou 2D axisymétrique [16, 17, 18].

L'étude est structurée en trois parties. Nous présentons dans une première section les caractéristiques de la source Thales et de ses nanostructures de carbone. Les résultats expérimentaux pertinents pour la modélisation y sont aussi présentés. La deuxième section se concentre sur la résolution de l'autoéchauffement d'une nanostructure isolée. Pour saisir les spécificités de cet autoéchauffement, toute la gamme d'émission de champ thermoassisté est explorée, jusqu'au champ de préclaquage. Fort de ces enseignements, la troisième section s'attaque enfin à l'influence combinée de la statistique de croissance et de l'espacement du réseau sur les performances d'émission d'un échantillon de 25 émetteurs, évaluées par notre algorithme 3D/2D.

## 6.1 Source Thales, statistique de croissance et modèle

Les travaux menés par Thales en partenariat avec l'université de Cambridge sur le développement d'une source d'électron à effet de champ basée sur l'émission depuis des nanostructures de carbone s'étalent sur près de 20 ans. Leurs efforts se sont particulièrement concentrés sur la capacité à produire des nanostructures de carbone les plus uniformes et verticales possibles, possédant un fort facteur d'aspect et selon une distribution contrôlée (réseaux réguliers).

Pour y parvenir, la technologie développée se base sur la réaction décrite par Ren *et al.* dans leur article de 1998 [19] d'un plasma d'acétylène et d'ammoniac avec un dépôt précurseur de nickel (Ni). Pour contrôler la position des émetteurs, un film fin de nickel (quelques nanomètres) est d'abord déposé sur le substrat de silicium puis structuré en réseau régulier de plots par gravure, typiquement par faisceau d'électrons. Ces plots de nickel sont ensuite chauffés à 700°C pour former des nanoparticules de forme quasi-sphérique, du fait de la mouillabilité du nickel et de sa forte tension de surface. Ces nanosphères sont ensuite utilisées comme précurseurs à la croissance des nanostructures par PECVD (*cf.* Fig. 6.1). La réaction s'effectue sous un plasma soigneusement proportionné d'acétylène ( $C_2H_2$ ) et d'ammoniac ( $NH_3$ ) : l'acétylène sert de source de carbone et catalyse la formation des parois graphitiques tandis que l'ammoniac réduit l'apparition d'autres phases du carbone (amorphe ou  $sp^3$ ), afin de produire une croissance sélective de nanostructures de graphite. De plus, la proportion d'acétylène influence la forme des nanostructures obtenues. Une plus grande proportion d'acétylène mène à des formes plus coniques (affinement du rayon au sommet).

Un autre paramètre entrant en jeu est l'amplitude du champ de gaine entre le plasma et le substrat [20]. Ce champ de gaine est contrôlé par une tension de polarisation (*bias* en anglais) appliquée au substrat. Plus le champ est important, plus la forme aura tendance à être conique. Cependant, c'est aussi le champ de gaine qui assure la verticalité des émetteurs [7] (*cf.* Fig. 6.2). Sachant que la conicité réduit le renforcement de champ, un compromis doit être trouvé pour assurer une bonne verticalité tout en conservant une forme bien profilée. Concernant le renforcement de champ, la hauteur des nanostructures est tout aussi critique. Elle peut heureusement être relativement contrôlée par le temps de réaction du dépôt PECVD (généralement de l'ordre de la dizaine de minutes pour obtenir des hauteurs de plusieurs micromètres).

Le dernier paramètre d'importance sur la croissance est la taille du plot précurseur de nickel, qui détermine dans une certaine limite le rayon des nanostructures. Lorsque ces dépôts sont trop

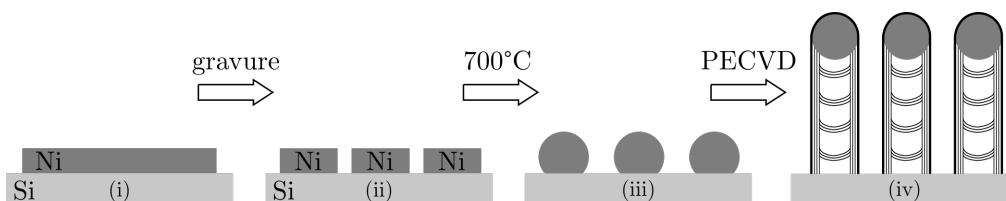


FIGURE 6.1 – Étapes de croissance d'un réseau de nanostructures de carbone.

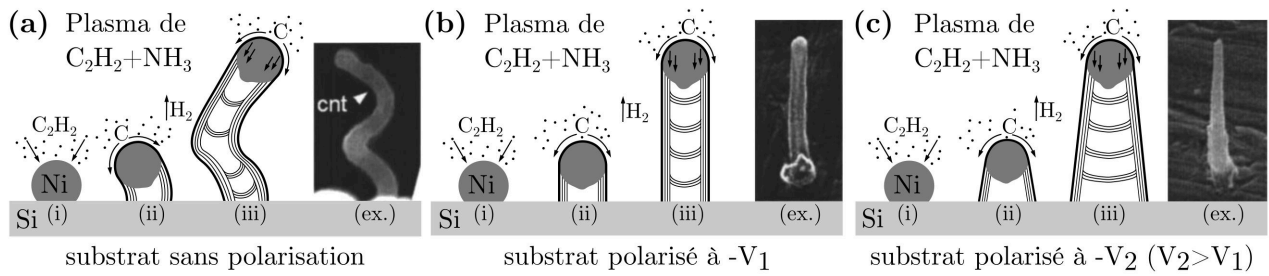


FIGURE 6.2 – Influence de la tension de polarisation sur la verticalité et la conicité des émetteurs. **(a)** : Croissance non verticale sur un substrat sans tension de polarisation. **(b)** : croissance verticale sur un substrat polarisé à  $-V_1$ . **(c)** : Croissance verticale avec un élargissement à la base dû à une tension de polarisation  $-V_2$  plus importante. Schéma reproduit à partir de la référence [20], Fig. 5.

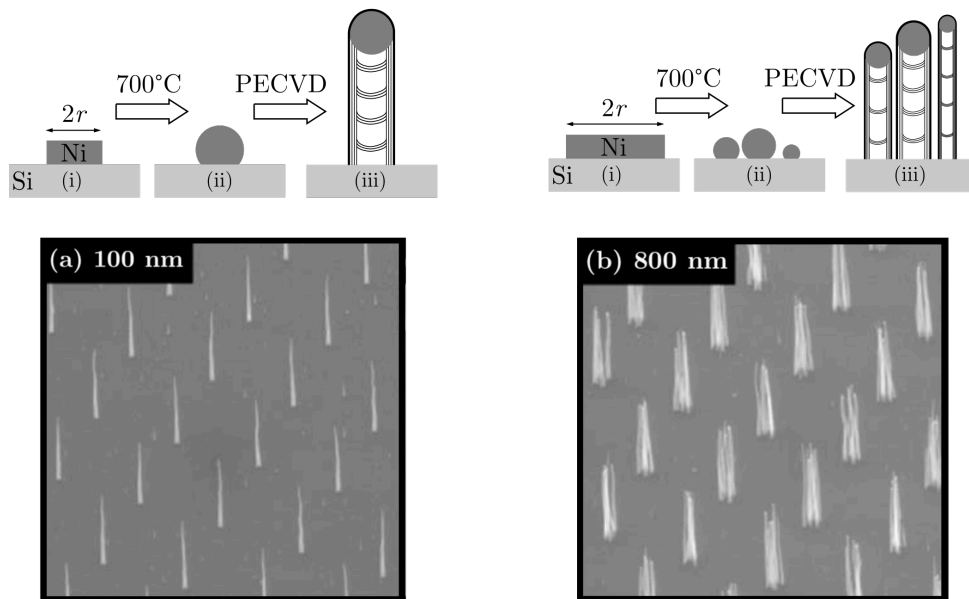


FIGURE 6.3 – Influence du rayon du plot précurseur de nickel. **(a)** : rayon de 100 nm. **(b)** : rayon de 800 nm. Dans les deux cas, l'épaisseur du plot est de 7 nm (schéma du milieu). Les micrographies ont été obtenues au microscope électronique à balayage et proviennent de la référence [5].

larges, on observe en moyenne la formation de plusieurs nanostructures à partir du même plot. Ce paramètre peut ainsi mener à la croissance d'un réseau de fagot de nanostructures, comme l'illustre la figure 6.3. Dans des conditions idéales, ces fagots pourraient présenter un intérêt pour la durabilité et l'intensité de la source. En pratique toutefois, ce design n'est généralement pas recherché :

« [...] the nucleation of multiple CNs from a large catalyst is a process with a significant degree of statistical spread in terms of number, height and diameter. [...] Thus, in order to achieve good structural uniformity, single isolated CNs must be grown. » [7] (sous-section 2.3)

La croissance plus aléatoire dans le cas d'une nucléation multiple nuit aux performances de l'émission, comme nous le verrons par la suite.

Enfin, mentionnons aussi les travaux plus récents menés par Thales concernant diverses pistes d'améliorations de la source par l'intégration d'électrodes supplémentaires pour le contrôle et la modulation du courant émis [21, 22].

Dans le cadre de notre étude toutefois, nous nous concentrons essentiellement sur le design original, présenté en détail dans l'article de 2014 de Cole *et al.* [8] (Fig. 6.4). Ce design consiste en un réseau



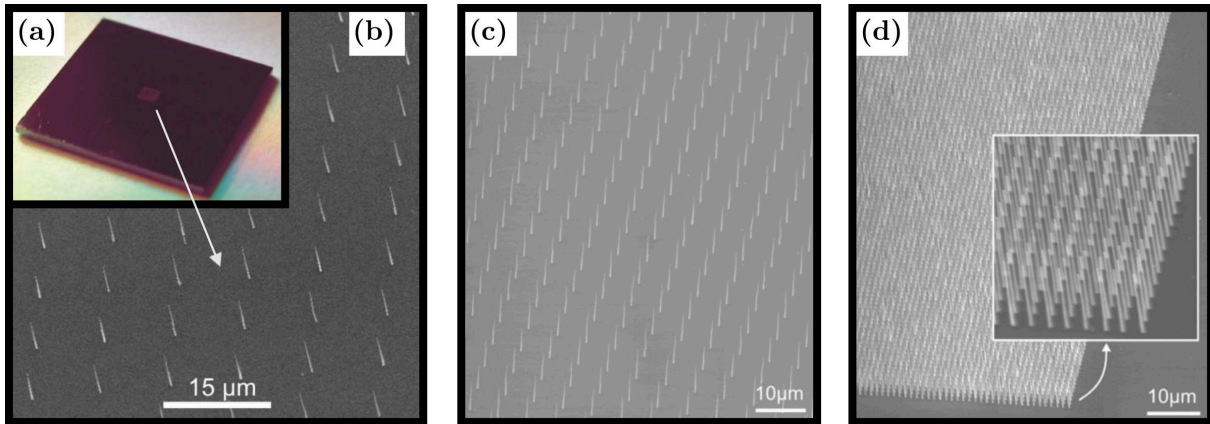


FIGURE 6.4 – Micrographies au microscope électronique de différents arrangements. **(a)** : Prototype de cathode correspondant à une puce de  $1\text{ cm} \times 1\text{ cm}$  gravée sur une surface centrale de  $1\text{ mm}^2$ . **(b)** : visualisation du réseau d'émetteurs à la surface de la puce avec un espacement de  $10\ \mu\text{m}$ . **(c)** : réseau avec un espacement de  $5\ \mu\text{m}$ . **(d)** : réseau avec un espacement de  $2\ \mu\text{m}$ . Les images proviennent de la référence [8].

carré régulier avec un seul émetteur à chaque nœud (rayon du précurseur de nickel de  $100\ \text{nm}$ ), cru à la surface d'une cathode faisant face à une anode plane. La densité d'émetteurs (l'espacement  $d$  du réseau) est contrôlée par la gravure initiale des plots précurseurs de nickel. L'article explore des espacements allant de  $2$  à  $10\ \mu\text{m}$ . La bonne uniformité des émetteurs qui ressort des micrographies de la figure 6.4 a été plus précisément quantifiée. Pour un rayon du précurseur de nickel de  $100\ \text{nm}$ , l'article rapporte une distribution gaussienne de la hauteur et du rayon au sommet. Les émetteurs ont une hauteur moyenne ( $\pm 1\sigma$ ) de  $5.8\ \mu\text{m}$  ( $\pm 6.3\%$ ) et un rayon moyen de  $24.5\ \text{nm}$  ( $\pm 4.1\%$ ), où  $\sigma$  est l'écart type de la mesure statistique. Ces résultats proviennent d'une mesure au microscope électronique à balayage de la géométrie de  $60$  émetteurs ([7], sous section 2.4, Fig. 7 et 8).

Concernant la structure même des émetteurs obtenus, des images plus précises au microscope électronique à transmission ont été réalisées (la figure 6.5 en donne un exemple). Ces images révèlent une structure proche des nanotubes de carbone multiparois – MWCNTs en anglais pour *Multi-Walled Carbon NanoTubes*, qui consiste en de multiples parois graphitiques orientées le long de l'axe de l'émetteur – et encapsule au sommet le dépôt initial de nickel (le catalyseur). Les mesures révèlent une épaisseur typiquement entre  $20$  et  $40$  feuillets de graphène. Toutefois, contrairement au MWCNTs, les parois sont ici légèrement inclinées par rapport à l'axe de croissance (forme conique) et exhibent des liaisons graphitiques centrales qui leur confèrent un aspect de bambou (empilement de cônes). Ces liaisons centrales sont caractéristiques de la croissance par PECVD [23, 24]. Une étude de dynamique moléculaire menée en 2006 par Ding *et al.* [25] avance que la formation de ces liaisons pourrait être causée par la diffusion du carbone depuis les points de contact de la particule précurseur avec la paroi extérieure. La structure en bambou suggère alors une croissance saccadée des émetteurs, entrecoupée de période de diffusion [26].

Par manque de temps, nous n'avons pas pu dans le cadre de cette thèse étendre notre modèle à cette géométrie plus complexe. Nous nous limiterons dans la suite à une géométrie sphère sur cône remplie. Ce choix a un impact considérable sur le volume des émetteurs et donc sur leur autoéchauffement, ce qui limite la comparaison de nos résultats avec les mesures expérimentales. Toutefois, une fois encore, l'intérêt de ces travaux préliminaires consiste plutôt à dégager des tendances générales. Dans cette optique, l'utilisation d'une géométrie simplifiée permet de généraliser plus facilement nos résultats pour la communauté des modélisateurs.

Par ailleurs, la conductivité électrique à température ambiante des nanostructures a été mesurée entre  $10^5$  et  $10^6\ \text{S/m}$  [7], des valeurs comparables à celle du graphite massif. Nous avons par conséquent choisi de définir les propriétés matériaux des émetteurs en accord avec celle du graphite, en reprenant les mesures expérimentales agrégées par Burchel et Pavlov dans leur chapitre d'encyclopédie dédié au graphite [27] (*cf.* annexe H).

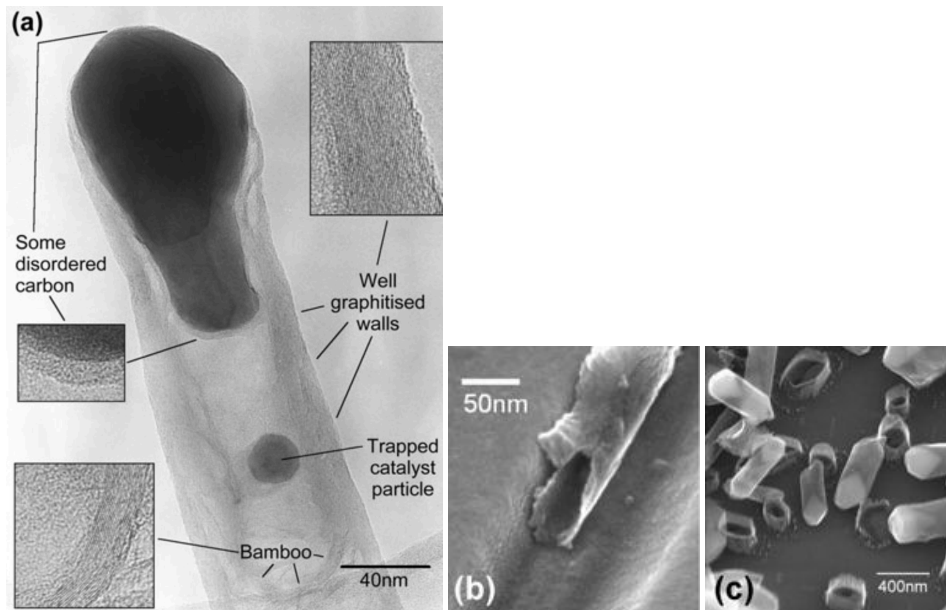


FIGURE 6.5 – Structure des émetteurs de type Thales. (a) : Micrographie au microscope électronique à transmission d'une nanostructure type Thales. Les inserts correspondent à un zoom  $\times 2.5$ . (b) et (c) : image au MEB d'éclats de nanostructures brisées, révélant leur nature creuse. Les images proviennent de la référence [7] (*in ref.* Fig. 2a).

Une prise en compte plus fine des propriétés matériaux sourcées par des mesures expérimentales exhaustives consistera en une très bonne perspective d'amélioration au même titre qu'une modélisation plus réaliste de la géométrie de ces structures.

## 6.2 Autoéchauffement d'un émetteur typique

Les émetteurs Thales ayant été présentés, concentrons-nous maintenant sur la transcription de leurs caractéristiques dans le cadre de notre modèle. Nous considérons dans cette section un émetteur isolé en graphite de géométrie axisymétrique sphère-sur-cône, schématisé sur la figure 6.6c. L'influence de la statistique de croissance étant présentée dans la prochaine section, nous fixons ici les paramètres de l'émetteur aux valeurs expérimentales moyennes : une hauteur  $H = 5.8 \mu m$  et un rayon au sommet  $R_s = 24.5 nm$ . Le facteur d'aspect vaut donc  $f = H/R_s = 237$ .

Pour ce qui est de la conicité des émetteurs, il n'y a pas eu de mesure systématique du rayon à la base. Cependant, une évaluation sur un émetteur typique permet de déterminer un angle de l'ordre du degré (*cf.* 6.6a et b), confirmant l'ordre de grandeur communiqué par Thales. On fixe ce paramètre à  $\alpha = 1^\circ = 0.0175 rad$  pour le reste du chapitre. Le rayon à la base de notre émetteur idéalisé vaut alors  $R_b = 125 nm$ . Une résolution électrostatique permet de déterminer le renforcement au sommet d'un tel émetteur :  $\beta = 158$ .

Précisons enfin que le graphite ne présente pas de point de fusion, mais une température de sublimation de l'ordre de  $4000 K$  sous  $1 atm$  à  $20^\circ C$  qui diminue avec une pression plus faible [28] (de l'ordre de  $2000 K$  sous  $10^{-5} mbar$  et  $1600 K$  sous  $10^{-9} mbar$ ). Cette spécificité du graphite rend délicate la définition du champ de préclaquage. Cependant, comme nous allons le détailler dans la suite de cette section, l'étude de l'autoéchauffement révèle qu'un emballement du chauffage résistif (*cf.* section 3.2) rend impossible l'établissement d'un régime permanent à des températures supérieures à  $1500 K$ . Nous définissons en conséquence le champ de préclaquage  $E_{pb}$  comme égal au champ seuil  $E_{th}$  du déclenchement de cet emballement.

Détaillons alors l'autoéchauffement de cet émetteur suivant un protocole similaire à celui développé au chapitre 3, en commençant par une analyse de l'émission en régime permanent. À partir

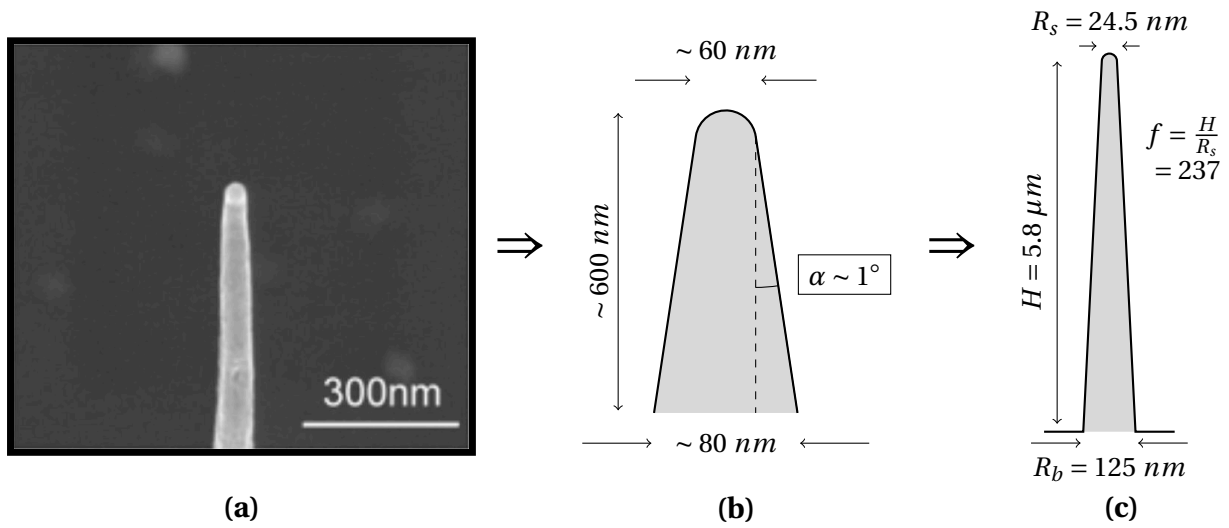


FIGURE 6.6 – (a) : Zoom sur le sommet d’une nanostructure type Thales. Image au microscope électronique à balayage avec un angle de  $40^\circ$ , provenant de la référence [8] (*in ref.* insert de la figure 3a). (b) : Déduction approximative de l’angle  $\alpha$  à partir de l’échelle de l’image de gauche (zoom) et de l’angle de vue du microscope. (c) : Géométrie idéale fixée pour l’étude d’une nanostructure isolée. Notre modèle suppose une géométrie remplie de type sphère sur cône.

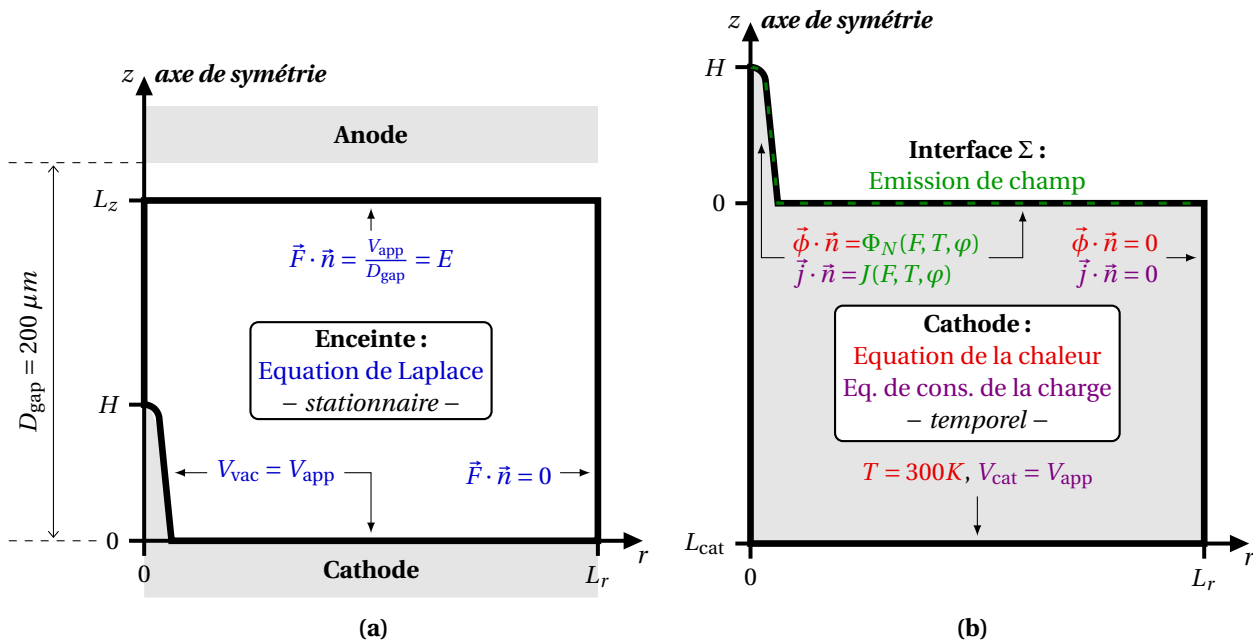


FIGURE 6.7 – Schéma des conditions aux limites pour la résolution de l’autoéchauffement d’un émetteur Thales. (a) : Résolution de l’équation de Laplace dans l’enceinte sous vide. (b) : Résolution des équations couplées de la chaleur et de la conservation de la charge dans la cathode. L’émission électronique et l’effet Nottingham sont utilisés comme conditions aux limites à l’interface métal-vide avec les valeurs du champ local  $F$  déterminés par l’équation de Laplace. Les schémas ne sont pas à l’échelle.

d'une recherche dichotomique du champ de seuil  $E_{th}$  à 0.01% près, on détermine la gamme de champ  $\Delta E = [E_{min}, E_{th}]$  qui correspond à une gamme de courant  $\Delta I = [I_{th}/10^3, I_{th}]$ , où  $I_{th}$  est le courant émis à  $E_{th}$ . On trouve  $E_{th} = 47.218 \text{ MV/m}$  et  $I_{th} = 0.21 \text{ mA}$ . On étudie ensuite l'émission en régime permanent au travers des mêmes variables globales  $\rho_J$ ,  $\rho_N$ ,  $T_{max}$ ,  $I$  et  $g_I$  définies au chapitre 3 par les équations 3.4 à 3.7. La variation de ces grandeurs sur toute la gamme  $\Delta E$  est présentée sur la figure 6.8. Chaque point de donnée est le résultat en régime permanent d'une résolution 2D axisymétrique suivant les conditions aux limites rappelées sur la figure 6.7.

Le graphique (a) montre une fois de plus que l'effet Nottingham ( $\rho_N$  proportionnel à  $I$ ) domine l'échauffement à faible champ tandis qu'il s'efface devant l'effet Joule ( $\rho_J$  proportionnel à  $I^2$ ) en régime d'émission intense. À l'approche du champ de seuil  $E_{th}$ , on voit que l'effet Joule devient très sensible à l'augmentation du champ. Cette sensibilité s'observe aussi très bien sur le graphique (b) qui révèle une montée très abrupte de la température maximale avec le champ : la pente de la courbe  $T_{max}(E)$  au niveau de la valeur seuil de  $1480 \text{ K}$  est quasiment verticale. Au-delà de  $E_{th}$ , aucun nouvel équilibre en régime permanent n'a pu être trouvé en deçà de  $6000 \text{ K}$ , ce qui peut être physiquement interprété par la destruction thermique inévitable de l'émetteur.

Les deux derniers graphiques (c) et (d) donnent la variation du courant et de la contribution thermique au courant – l'écart  $g_I$  entre  $I(300 \text{ K})$  et  $I(T)$ . Ils offrent un constat similaire aux deux premiers graphiques : une montée très abrupte de  $I(T)$  et  $g_I$  à l'approche du champ seuil.

En comparaison avec les émetteurs hémipellipsoïdaux en titane (chapitre 3, figure 3.7), ce comportement traduit une bien plus grande sensibilité des émetteurs Thales à l'échauffement. Cette sensibilité peut s'expliquer par une conductivité électrique plus faible et la combinaison d'une géométrie plus étriquée (section transversale quasi constante) et d'une conductivité thermique moindre, favorisant l'emballlement de l'effet Joule devant l'évacuation thermique (cf. annexe H). En conséquence, les émetteurs Thales présentent un régime d'émission thermo-champ  $[E_{1\%}, E_{th}]$  plus resserré qui mène plus rapidement à une destruction thermique de l'émetteur à mesure que le champ augmente.

Pour bien comprendre l'instabilité qui apparaît au-delà de  $E_{th}$ , détaillons l'évolution temporelle de l'autoéchauffement. La figure 6.9 montre l'évolution à  $E_{th} = 47.218 \text{ MV/m}$  et à  $E_{th} + \delta = 47.223 \text{ MV/m}$ , avec  $\delta = 5 \text{ kV/m}$  de sorte que  $\delta/E_{th} \sim 0.01\%$ . Après une montée en tension sur les premières nanosecondes appelé par le graphique (a), on observe sur les graphiques (b), (c) et (d) une évolution indiscernable de chaque grandeur jusqu'à  $t \sim 4 \mu\text{s}$ . Au-delà de  $4 \mu\text{s}$ , on voit que la température à  $E_{th}$  tend vers un équilibre à  $1480 \text{ K}$ , tandis qu'elle diverge avec une pente quasiment verticale à  $E_{th} + \delta$ . On observe le même comportement sur le graphique (c) pour les grandeurs de chauffage  $\mathcal{P}_J$ ,  $\mathcal{P}_N$ ,  $\mathcal{P}_\theta$ . Si l'on regarde plus attentivement le graphique (c) autour de 4–5 microsecondes, on voit que c'est pour le chauffage Joule (courbes rouges) que la courbe à  $E_{th} + \delta$  (marqueurs +) se distingue en premier de la courbe à  $E_{th}$  (marqueurs carrés). Ce détail témoigne de l'enclenchement d'un emballlement de l'effet Joule. La montée en température qui en résulte cause par la suite un accroissement de l'évacuation thermique ( $\mathcal{P}_\theta$ ) et de l'évacuation par effet Nottingham ( $\mathcal{P}_N$  devenu négatif) mais qui restent insuffisants pour stabiliser l'emballlement résistif. Ce constat est confirmé par le graphique (d) qui montre un chauffage net  $\dot{Q} = \mathcal{P}_J + \mathcal{P}_N + \mathcal{P}_\theta$  positif, qui diverge au-delà de  $7 \mu\text{s}$ . Cet emballlement est similaire à celui détaillé au chapitre 3 (sec. 3.2) pour un émetteur hémipellipsoïde de tungstène (cf. figure 3.13).

Deux différences sont en revanche à noter. Premièrement, les lignes en tiret vertes du graphique (b) indiquent que lorsque l'emballlement a lieu, la température d'inversion a été dépassée pour une partie de la surface d'émission, mais pas encore au sommet (la température d'inversion diminue avec le champ local  $F$ ). Deuxièmement, on ne trouve pas ici de nouvel équilibre pour des températures raisonnables au-delà du champ seuil (i.e.,  $\Delta T_{max} \rightarrow \infty$ ). Il n'y a donc pas ici de bistabilité d'inversion Nottingham.

Nous avons déjà observé ce type d'emballlement au cours de travaux exploratoires sur des géométries d'émetteurs Thales, mais avec les conductivités et le travail de sortie du titane et du tungstène. Ainsi, au-delà de l'influence certaine de la plus faible conductivité électrique du graphite sur l'emballlement (cf. figure H.1), l'explication principale de ces différences (en particulier l'absence de

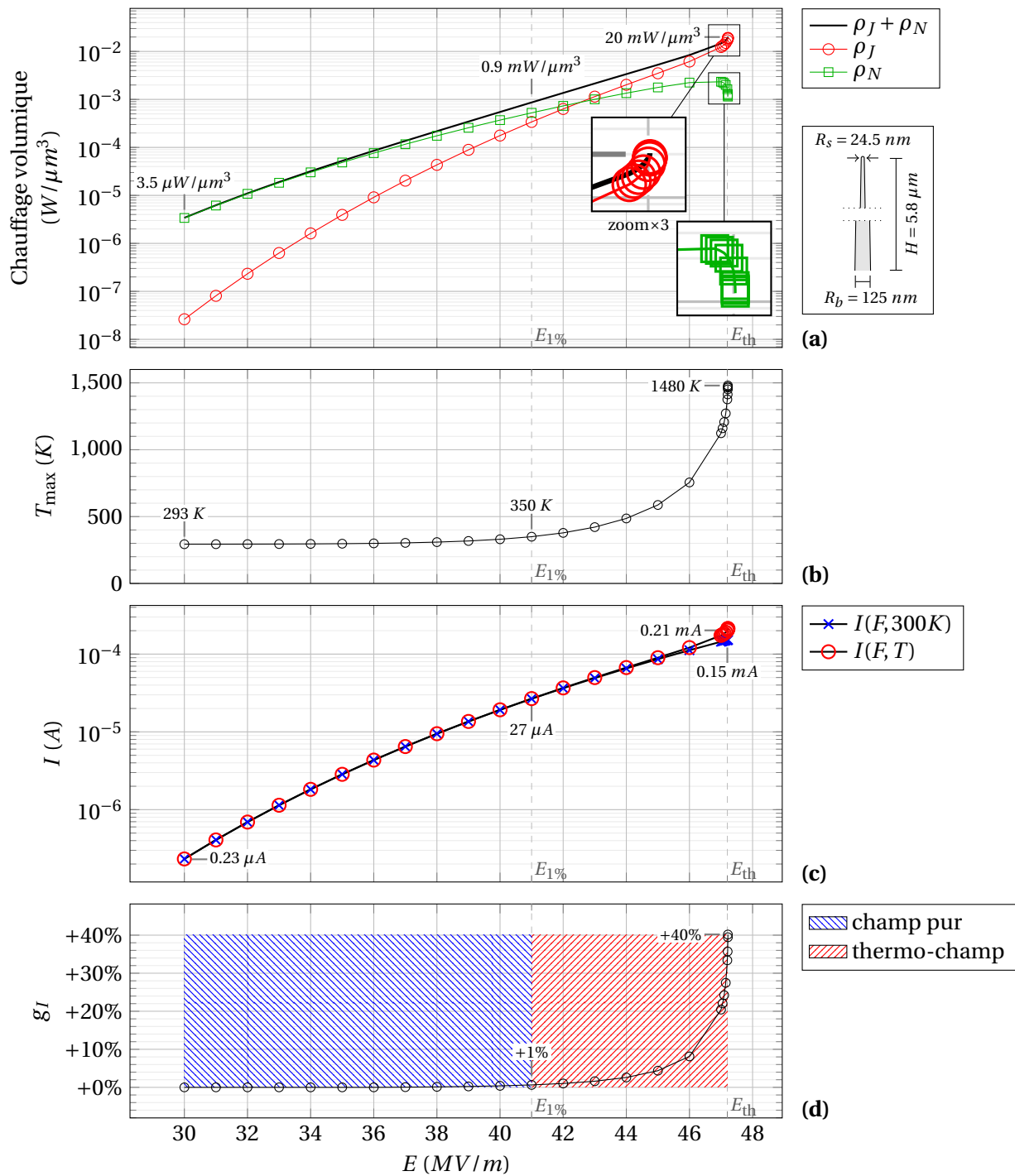


FIGURE 6.8 – Variation avec le champ appliqué  $E$  des grandeurs globales définies par les équations 3.4 à 3.7 sur la gamme  $\Delta E = [E_{\min}, E_{\text{th}}]$ . **(a)** : Variation des chauffages Joule et Nottingham moyennés sur le volume. Le schéma en insert rappelle la géométrie de l'émetteur. **(b)** : Augmentation de la température maximale  $T_{\text{max}}$  à l'intérieur de l'émetteur. **(c)** : Variation du courant émis sans et avec la contribution de l'échauffement. **(d)** : Gain relatif en courant lié à l'augmentation en température de la surface d'émission. Ce gain correspond à l'écart relatif entre les courbes  $I(F, 300 \text{ K})$  et  $I(F, T)$ . Une séparation arbitraire à  $g_I = 1\%$  est mise en évidence par les hachures bleues et rouges pour délimiter le régime de pure émission de champ de celui du régime d'émission thermo-champ.

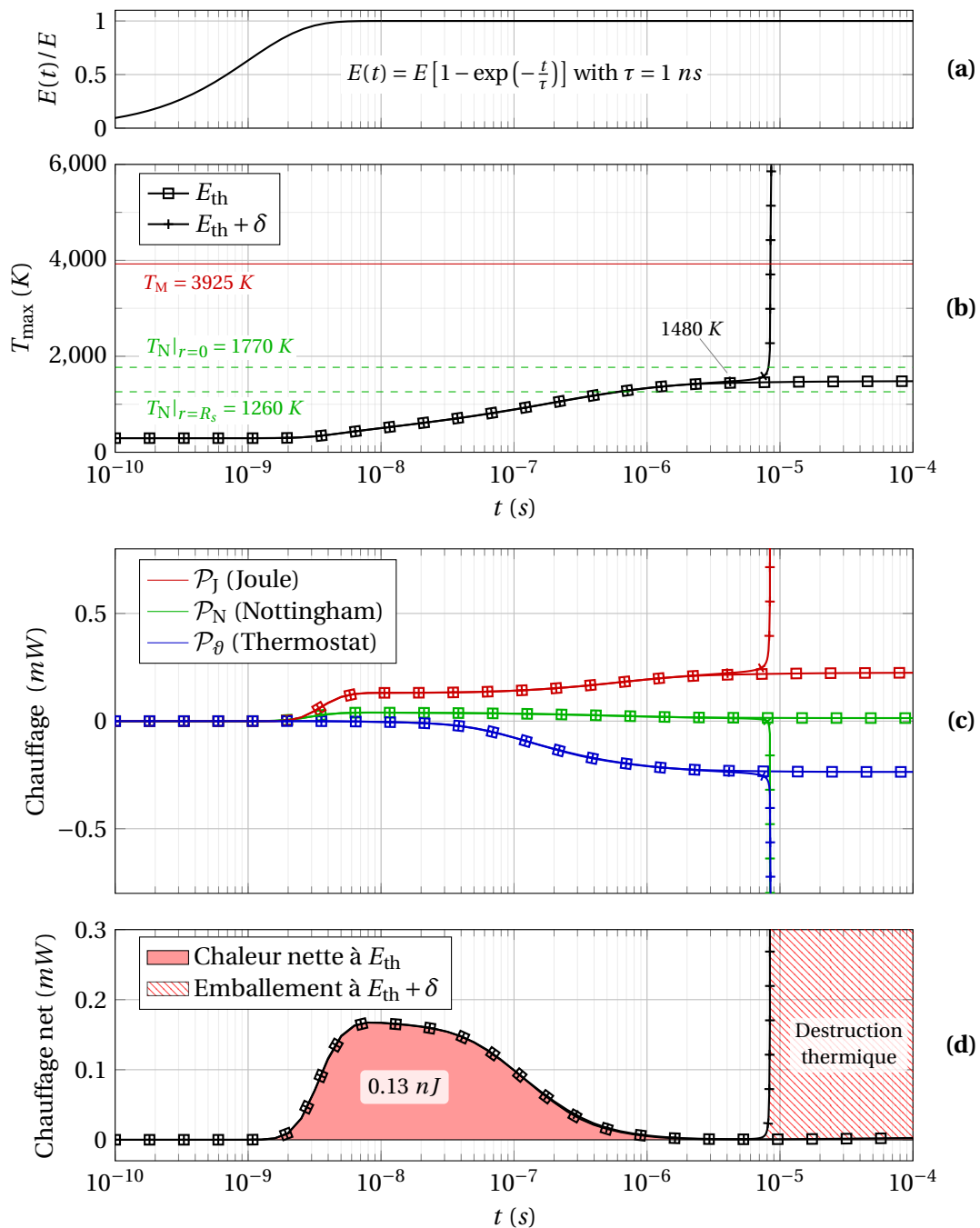


FIGURE 6.9 – Comparaison de l'évolution de l'auto échauffement d'un émetteur Thales à  $E_{\text{th}} = 47.218 \text{ MV/m}$  et  $\delta = 5 \text{ kV/m}$  au dessus à  $E_{\text{th}} + \delta = 47.223 \text{ MV/m}$ . **(a)** : Champ électrique appliqué. **(b)** : Température maximale atteinte dans l'émetteur. **(c)** : Grandeurs globales de chauffage (cf. Eq. 3.2 et 3.3). **(d)** : Chauffage net (somme des trois termes de chauffage). La chaleur accumulée à  $E_{\text{th}}$  est précisée.

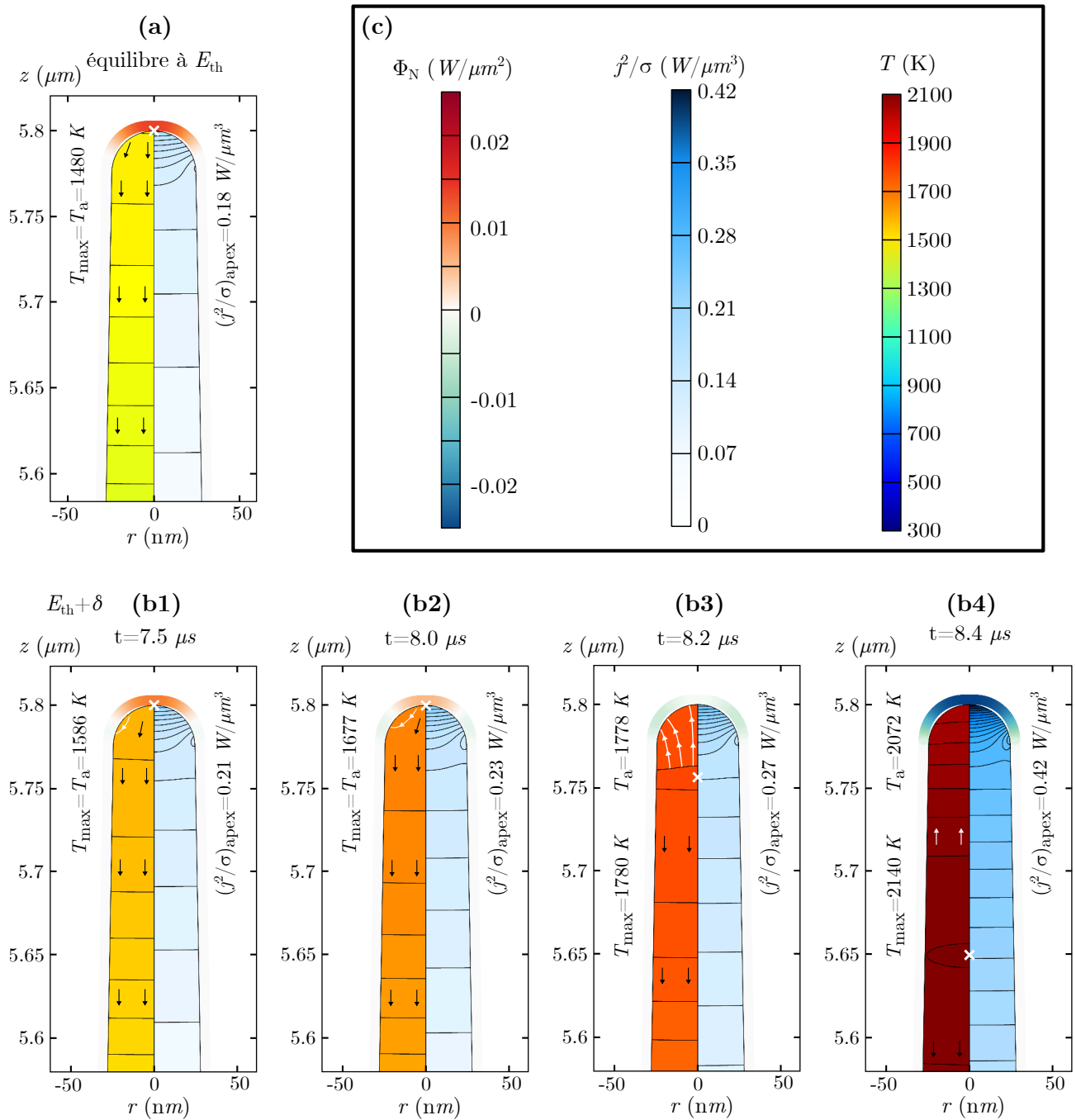


FIGURE 6.10 – Distribution de la densité de flux de chaleur Nottingham  $\Phi_N$ , de la densité volumique de chauffage Joule  $j^2/\sigma$  et de la température au voisinage du sommet de l'émetteur. Les flèches et lignes de courant illustrent la direction du flux de chaleur, mais ne sont pas proportionnelles à son amplitude et sont données à titre indicatif. La croix blanche indique la position de la température maximale. **(a)** : Carte en régime permanent à  $E_{\text{th}}$ . **(b)** : Cartes en régime transitoire à  $E_{\text{th}} + \delta$  au temps **(b1)** :  $t = 7.5$   $\mu\text{s}$ , **(b2)** :  $t = 8.0$   $\mu\text{s}$ , **(b3)** :  $t = 8.2$   $\mu\text{s}$  et **(b4)** :  $t = 8.4$   $\mu\text{s}$ . **(c)** : Échelles communes de couleur pour chaque grandeur. L'écart en température entre deux isothermes successives est de 10 K. L'écart en densité de puissance entre deux isolignes successives est de  $0.01$   $\text{W}/\mu\text{m}^3$ .

bistabilité) est à aller chercher dans la géométrie : la combinaison d'une géométrie sphère sur cône et d'un très fort facteur d'aspect donne une variation très faible de la section transverse le long de l'axe de l'émetteur. En conséquence, la proportion du volume de l'émetteur qui contribue au chauffage résistif est beaucoup plus importante que dans le cas des émetteurs hémipellipsoïdaux.

Pour appuyer ce propos, la figure 6.10 montre les distributions en température  $T$ , chauffage résistif volumique  $j^2/\sigma$ , et densité surfacique de flux de chaleur Nottingham  $\Phi_N$  pour  $E_{th}$  et  $E_{th} + \delta$  à différents instants. Là où le chauffage résistif diminuait de plus de deux ordres de grandeur sur 200 nm pour les émetteurs hémipellipsoïdaux (cf. figure 3.4), il est beaucoup plus homogène sur les graphiques de la figure 6.10. À partir de la valeur au sommet et sachant que l'écart entre deux isolignes successives vaut  $0.01 W/\mu m^2$ , on peut par exemple évaluer une diminution de 0.18 à  $0.06 W/\mu m^3$  sur la graphique (a) et de 0.42 à  $0.19 W/\mu m^3$  sur le graphique (b4) entre la valeur à  $5.8 \mu m$  et celle à  $5.6 \mu m$  : une diminution d'un facteur 2 à 3 sur 200 nm. Ce constat est bien lié à la très faible variation de la section transverse le long de l'axe de l'émetteur. Dans le cas extrême d'une géométrie sphère sur cylindre ( $\alpha = 0$ ), le chauffage Joule ne varierait que dans le chapeau sphérique de l'émetteur et serait constant dans toute la tige.

Ainsi, l'effet Joule est dominant à l'approche du champ seuil et l'autoéchauffement n'est pas ralenti par un effet Nottingham refroidissant. On peut vérifier ce propos sur le graphique (a) de la figure 6.8 qui indique que l'effet Nottingham est encore globalement chauffant ( $\rho_N \sim 1 mW/\mu m^3$ ), et environ 10 fois plus faible que l'effet Joule ( $\rho_J \sim 10 mW/\mu m^3$ ). Lorsque l'emballement s'enclenche, ni la rétroaction négative de l'effet Nottingham avec la température ni celle de la dissipation thermique ne parviennent à freiner l'emballement de l'effet Joule (boucle de rétroaction positive de la température sur le chauffage résistif). Pour reprendre le formalisme développé à la sous-section 3.2.4, les paramètres de l'émetteur Thales semblent ici fortement favoriser  $|\partial_T \mathcal{P}_J|$  aux dépens de  $|\partial_T \mathcal{P}_N|$  et  $|\partial_T \mathcal{P}_\theta|$ .

Pour étayer ce constat, on peut suivre le passage à un effet Nottingham refroidissant sur les graphiques (b1), (b2), (b3) et (b4) de la figure 6.10. Au temps  $t = 7.5 \mu s$  (graphique b1), la température maximale a atteint  $1586 K$  et on voit apparaître le refroidissement Nottingham sur notre échelle de couleur (les lignes de courant blanches mettent en évidence l'évacuation d'une partie de la chaleur à la surface émissive). Cette tendance s'intensifie à  $t = 8 \mu s$  (graphique b2) et à  $t = 8.2 \mu s$  (graphique b3) la température maximale  $T_{max} = 1780 K$  a finalement dépassé la température d'inversion au sommet,  $T_N = 1770 K$ . En conséquence, la température maximale se retrouve  $24 nm$  en dessous du sommet (croix blanche). L'enfoncement du maximum s'accélère à mesure que l'augmentation de la température et du courant renforce le refroidissement Nottingham. À  $t = 8.4 \mu s$  (graphique b4) la température maximale est située à  $5.65 \mu m$ . En revanche, elle ne s'écarte de la température au sommet  $T_a$  que d'environ  $70 K$ . Ce faible gradient de température (à comparer à celui de la figure 3.11b) témoigne d'un refroidissement Nottingham trop faible pour ralentir l'emballement de l'effet Joule.

Les courbes de la figure 6.11 permettent de suivre de manière plus quantitative la suite de l'emballement au delà de  $8.4 \mu s$ . Ces courbes montrent l'évolution du profil de température au centre de l'émetteur le long de l'axe  $z$ . En moins d'un dixième de microseconde, on voit que l'enfoncement du maximum de température se poursuit mais s'accompagne d'une accélération de l'échauffement, et non d'un ralentissement : la rétroaction positive de l'effet Joule l'emporte et l'instabilité n'est pas amortie.

À  $t = 8.49 \mu s$ , la température maximale dépasse  $4000 K$  et se retrouve environ  $400 nm$  en dessous du sommet. On peut interpréter ce résultat par la dislocation de l'émetteur à la position  $z_{br}$  – indexé « br » pour *breaking* en anglais. Ce type de dislocation a d'ailleurs déjà été observé expérimentalement [29] et des travaux de modélisation ont montré comment l'enfoncement du maximum de température dans la tige du fait du refroidissement Nottingham en surface pouvait expliquer cette observation [30, 18]. En revanche, ces travaux se sont limités à des recherches auto-cohérentes de solutions stationnaires de l'autoéchauffement. Notre étude temporelle permet de suivre l'évolution de l'autoéchauffement et ainsi de mettre en évidence un comportement instable du chauffage résistif au-delà d'une valeur seuil.

Toutefois, l'intérêt de cette section était essentiellement de comprendre le comportement ther-



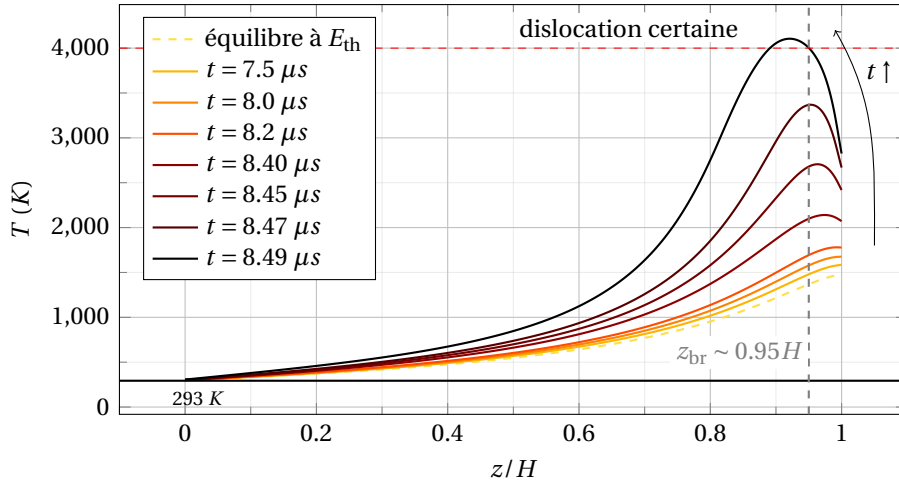


FIGURE 6.11 – Evolution au cours de l’emballement résistif du profil axial de température  $T(z)$  à  $E_{th} + \delta$ . La comparaison avec le profil en régime permanent à  $E_{th}$  (courbe dorée en tiret) montre comment le dépassement du champ seuil mène à un emballement thermique qui provoque la destruction de l’émetteur.

mique des émetteurs à l’approche de leur champ de préclaquage pour mieux pouvoir étudier ensuite les performances d’un réseau d’émetteurs. Nous ne nous étendons donc pas plus sur l’analyse fine de l’instabilité et tournons maintenant notre attention sur l’influence de la statistique de croissance.

## 6.3 Effet de la statistique de croissance sur la performance de l’émission

### 6.3.1 Statistique de croissance et échantillonnage

Maintenant que nous avons compris le mécanisme de destruction prématurée des émetteurs Thales, nous allons pouvoir nous intéresser aux performances d’émission d’un réseau entier. La compréhension de la destruction thermique d’un émetteur va nous permettre d’étudier les performances limites du réseau, et de les comparer en fonction de l’espacement et de la statistique du réseau.

Considérons pour commencer la statistique de croissance indiquée par les mesures expérimentales de Teo *et al.* [7, 8] :  $H = 5.8 \mu m \pm 6.3\%$  et  $R_s = 24.5 nm \pm 4.1\%$ . Hauteur et rayon étant supposés être distribués normalement et de manière non corrélée, on peut déterminer la propagation au premier ordre de cette fluctuation sur le facteur d’aspect :

$$f = \frac{H}{R_s} \quad \text{d'où} \quad \langle f \rangle = \frac{\langle H \rangle}{\langle R_s \rangle} \quad \text{et} \quad \frac{\sigma_f}{f} = \sqrt{\left(\frac{\sigma_H}{\langle H \rangle}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{R_s}}{\langle R_s \rangle}\right)^2} \quad (6.1)$$

Le facteur d’aspect devrait donc être lui aussi distribué selon une gaussienne centré sur  $f = 237$  ( $\pm 7.5\%$ ).

Pour des raisons de temps de calcul et pour pouvoir explorer aisément une large gamme de paramètres avec la puissance de calcul d’un ordinateur personnel, nous avons choisi de limiter notre étude à un réseau de 25 émetteurs présenté sur le schéma de la figure 6.12. Des conditions aux limites de symétrie miroir sur les faces latérales du domaine de simulation situées à une distance  $d/2$  des bords du réseau permettent de simuler un réseau infini. Ce type de conditions aux limites maintient toutefois un autre biais pour les émetteurs des bords qui font alors face à des émetteurs qui leur sont identiques. Il faut admettre ici que l’habitude d’avoir travaillé jusqu’ici avec des émetteurs identiques a occulté l’idée plus pertinente d’utiliser de véritables conditions aux limites périodiques, ce qui devra être corrigées pour les études futures. Par ailleurs, ces 25 émetteurs représentent un petit échantillon, nécessairement biaisé par rapport à la distribution exacte.

Les histogrammes de la figure 6.13 indiquent les distributions effectives en hauteur, rayon et facteur d’aspect par rapport aux distributions exactes (courbes rouges). On voit que si la distribution en

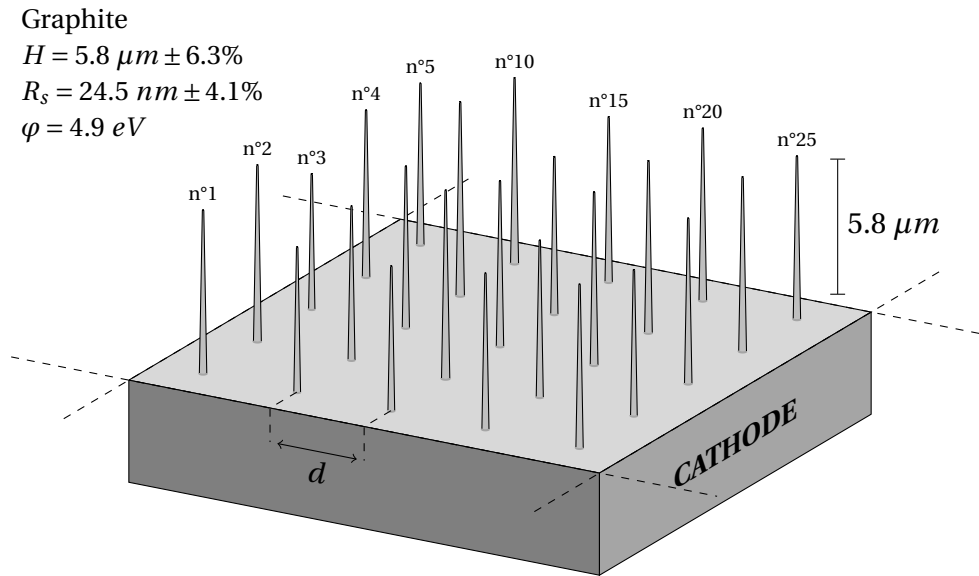


FIGURE 6.12 – Schéma du réseau  $5 \times 5$  avec statistique de croissance. Les traits discontinus rappellent que les conditions aux limites simulent un réseau infini (symétrie miroir sur les faces latérales du domaine de simulation à une distance  $d/2$  du bord du réseau). Les émetteurs sont ici à l'échelle. Le schéma de numérotation est donné par l'indication d'une partie des numéros.

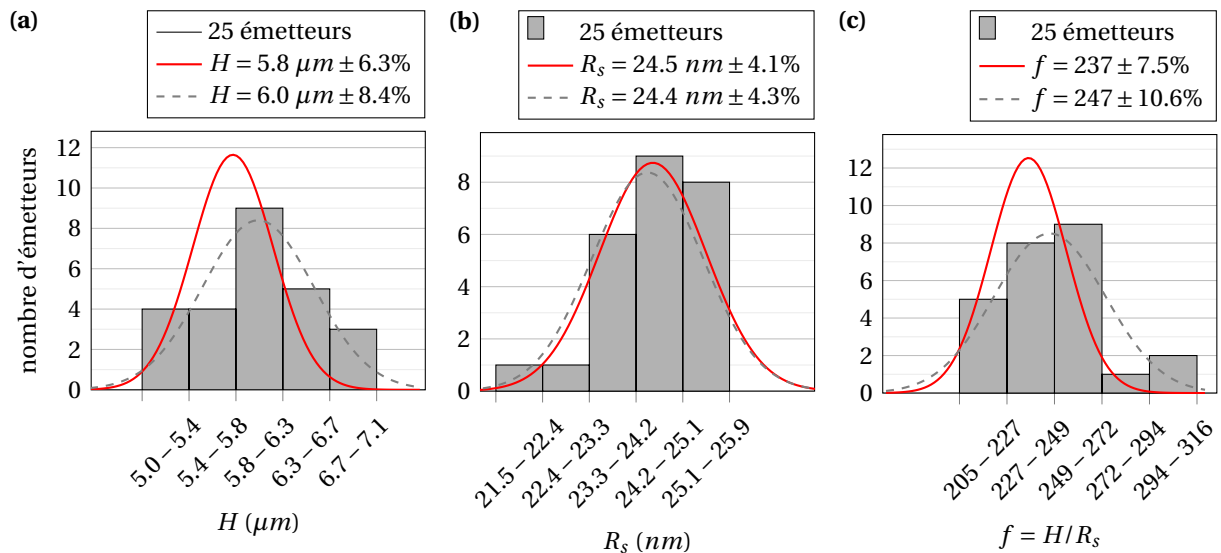


FIGURE 6.13 – Histogrammes de la répartition en hauteur (a) et en rayon (b) des 25 émetteurs tirés au hasard à partir des distributions en rouges. (c) : histogramme pour la distribution du facteur d'aspect. La distribution en rouge est déduite en combinant celles sur la hauteur et le rayon (Eq. 6.1). Les densités de probabilités continues (courbes rouges et grises) sont mises à l'échelle par égalité de leur intégrale avec celle de l'histogramme.

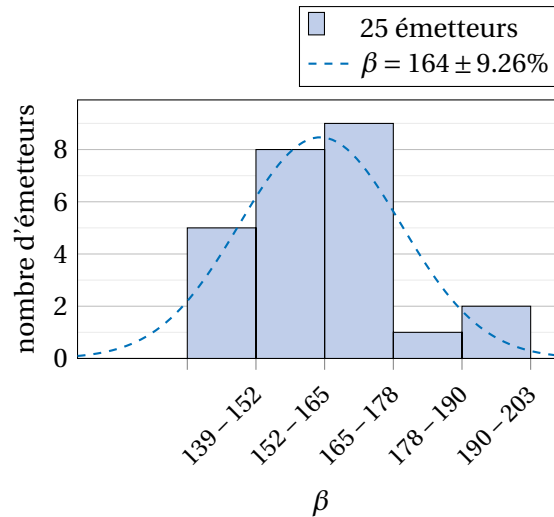


FIGURE 6.14 – Distribution du renforcement de champ des 25 émetteurs pris chacun de manière isolée (absence d'écrantage).

rayon est plutôt bien représentative, la distribution en hauteur est légèrement biaisée vers des hauteurs plus élevées (avec une moyenne de  $6.0 \mu m$  au lieu de  $5.8 \mu m$ ). Ce léger biais se répercute sur le facteur d'aspect qui est alors en moyenne légèrement augmenté : 247 au lieu de 237. Bien que ces détails ne modifient pas les tendances globales que nous allons analyser dans la suite, il est intéressant de les avoir à l'esprit, notamment dans une optique de comparaison à un réseau d'émetteurs tous identiques qui suivraient la géométrie moyenne.

Une première série de simulations électrostatique des 25 émetteurs pris *individuellement* révèle sur la figure 6.14 une distribution en renforcement de champ au sommet qui suit celle du facteur d'aspect, avec une valeur moyenne de 164, légèrement au-dessus du renforcement de l'émetteur moyen ( $H = 5.8 \mu m$  et  $R_s = 24.5 nm$ ) qui valait 158.

Un renforcement de champ différent pour chaque émetteur signifie une gamme d'émission différente. Les émetteurs avec le plus fort renforcement de champ émettront les premiers, mais seront aussi les premiers sujets à l'autoéchauffement. Si l'on veut éviter toute destruction thermique (qui pourrait éventuellement compromettre le vide d'une source scellé, ou endommager les émetteurs voisins), la tension d'opération de la source doit être limitée à la plus faible des tensions de claquage de chaque émetteur. À cette tension cependant, tout les émetteurs ne seront pas en mesure d'émettre un courant significatif. Par ailleurs, dans les réseaux denses d'émetteurs, ce phénomène est amplifié par l'écrantage, qui sera plus ou moins fort pour chaque émetteur en fonction des paramètres des émetteurs voisins. Une source supplémentaire d'aléas dans la distribution effective du renforcement de champ.

### 6.3.2 Accroissement de la dispersion avec la densification du réseau

Dans l'article de Cole *et al.* de 2014 [8], l'émission de différents réseaux est mesurée expérimentalement, avec des espacements allant de 1 à  $10 \mu m$ . En particulier, l'article compare ensuite la distribution de renforcement de champ entre deux réseaux d'espacement  $2 \mu m$  et  $10 \mu m$ . Dans le cas de notre réseau infini avec une statistique échantillonnée sur 25 émetteurs, on obtient un résultat similaire, présenté sur la figure 6.15 : la valeur moyenne du renforcement de champ est environ trois fois plus petite avec un espacement de  $d = 2 \mu m$ . Pour ce qui est de l'étalement statistique, la largeur à mi-hauteur est légèrement plus petite à  $d = 2 \mu m$  : 29.4 contre 32.9 à  $d = 10 \mu m$ . La distribution à  $d = 2 \mu m$  peut alors paraître plus resserrée, mais il faut faire attention : c'est l'écart relatif du renforcement de champ et non l'écart absolu qui va jouer un rôle déterminant dans la répartition du courant entre émetteurs.

La figure 6.16 montre que si l'on centre et réduit la distribution en renforcement de champ, on

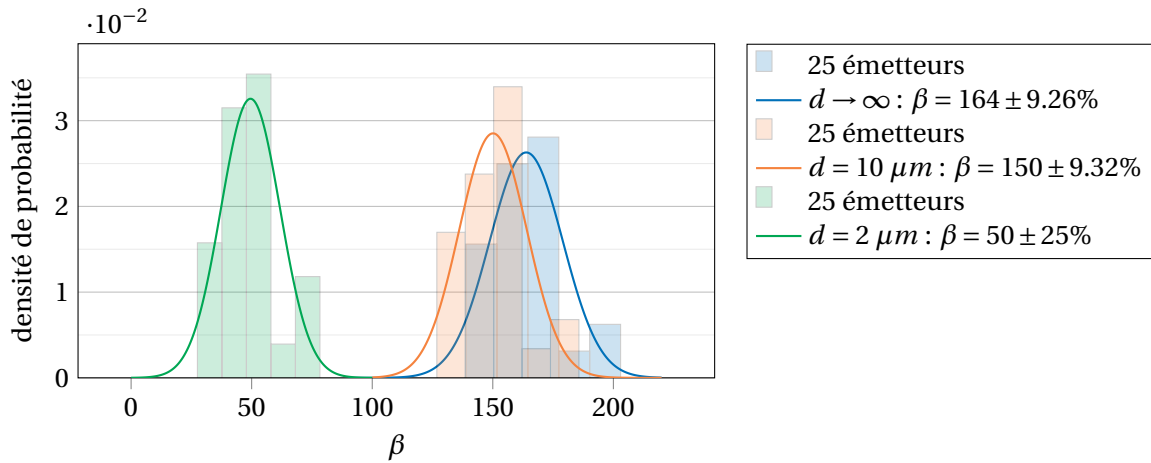


FIGURE 6.15 – Variation de la distribution du renforcement de champ avec l’espacement du réseau. La variation est due à l’écrantage qui augmente à mesure que la distance entre les émetteurs diminue.

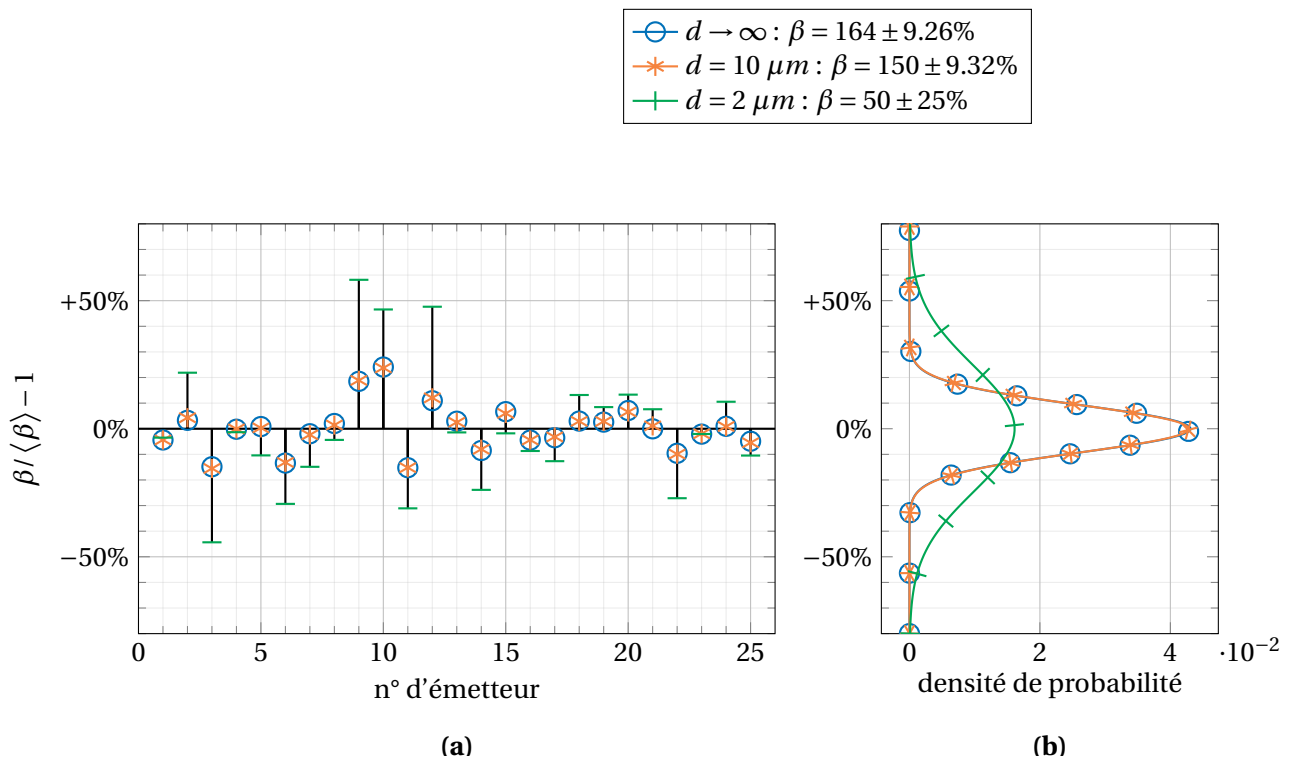


FIGURE 6.16 – (a) Écart relatif par rapport à la moyenne du renforcement de champ de chacun des 25 émetteurs. (b) Distribution centrée réduite correspondante à partir de la moyenne et de l’écart type en supposant une gaussienne. Le graphique est tourné à 90° de sorte que son axe des abscisses concorde avec l’axe des ordonnées du premier graphique.

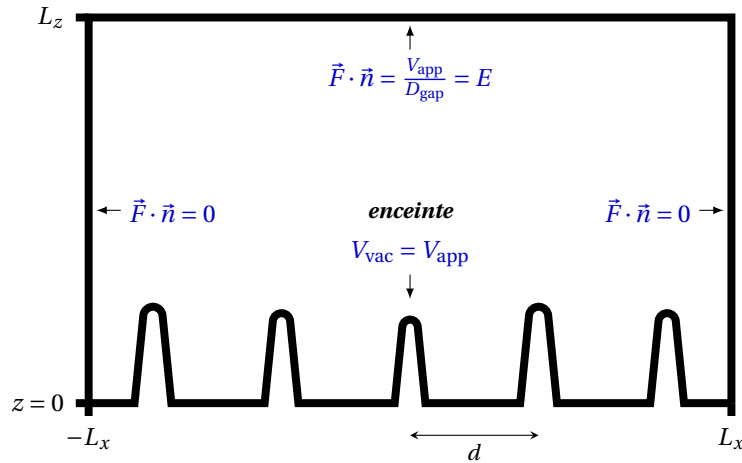


FIGURE 6.17 – Conditions aux limites pour la résolution 3D électrostatique visualisée le long d'une coupe 2D selon l'axe  $x$ . Le schéma n'est pas à l'échelle.

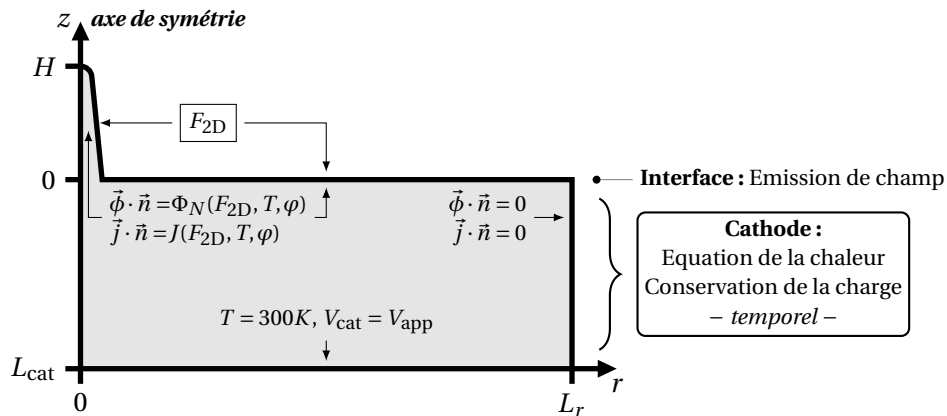


FIGURE 6.18 – Conditions aux limites de la résolution 2D axisymétrique de l'autoéchauffement de chaque émetteur.

obtient une largeur à mi-hauteur pour  $d = 2 \mu m$  beaucoup plus grande ( $\sigma = 25\%$ ) qu'à  $d = 10 \mu m$  ( $\sigma = 9.32\%$ ). L'explication de ce résultat est le suivant : la densification du réseau accroît l'écrantage et favorise donc cette source supplémentaire d'aléatoire. Le renforcement de champ effectif de chaque émetteur devient de plus en plus dépendant de ses voisins et il a une probabilité aléatoire de se retrouver à côté de voisins plus grands ou plus petits que lui, ce qui accroît *in fine* la dispersion statistique.

Pour évaluer les conséquences sur l'émission d'une dispersion plus grande du renforcement de champ, il faut calculer l'émission du réseau. Pour réaliser cela, on utilise notre algorithme de simulation 3D/2D (cf. figure 5.7). L'électrostatique est d'abord résolue pour les 25 émetteurs en 3D avec l'espacement  $d$  choisi et les conditions aux limites rappelées sur la figure 6.17. Dans un second temps, on détermine le champ  $F_i^{2D}$  équivalent à la surface de l'émetteur  $n^{\circ}i$  et on le donne en entrée d'une simulation 2D axisymétrique avec les conditions aux limites rappelées sur la figure 6.18, et ce pour chacun des 25 émetteurs. On parvient ainsi à résoudre en moins d'une demi-heure<sup>1</sup> l'émission et l'autoéchauffement de tout le réseau, là où la puissance de calcul d'une station de travail actuelle est insuffisante pour un calcul 3D complet.

Les graphiques supérieurs de la figure 6.19 montre l'évolution de la température des 25 émetteurs

1. En imposant 3000 éléments à la surface des hémisphères de chaque émetteur pour le maillage, on obtient un compromis entre précision et puissance de calcul requise et on parvient à résoudre l'électrostatique en une dizaine de minute environ. La résolution 2D étant bien moins exigeante, on peut facilement limiter le temps de calcul à une trentaine de secondes par émetteur tout en conservant une très bonne précision.

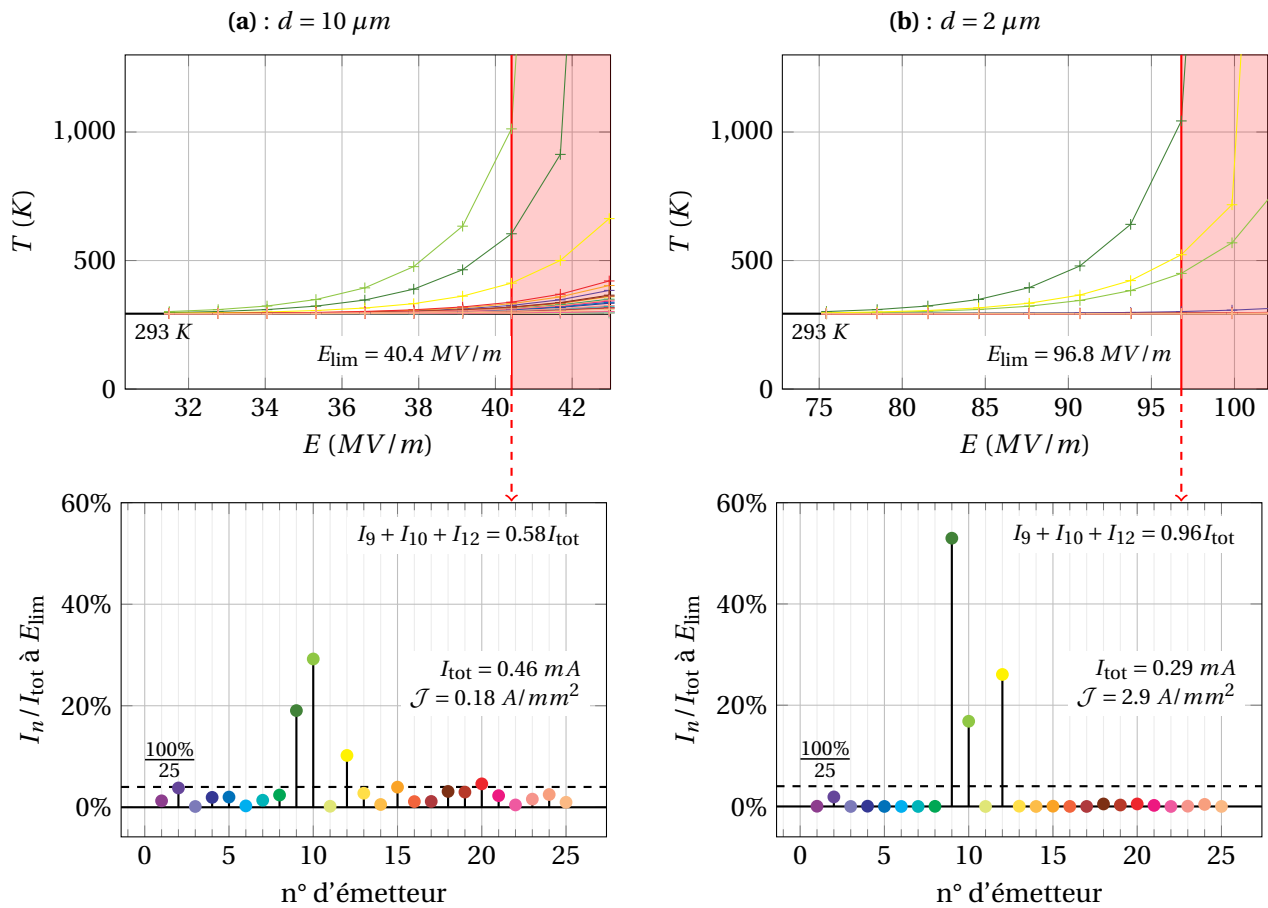


FIGURE 6.19 – Graphiques supérieurs : Augmentation avec le champ appliqué de la température maximale des 25 émetteurs jusqu'au champ limite, le champ d'occurrence de la première destruction thermique. Graphiques inférieurs : Répartition du courant total entre les émetteurs au champ limite. Les couleurs attribuées à chaque émetteur sont cohérentes entre les graphiques. **(a)** : Espacement du réseau  $d = 10 \mu m$ . **(b)** : Espacement du réseau  $d = 2 \mu m$ .

jusqu'au champ limite  $E_{\text{lim}}$  (première destruction thermique), tandis que les graphiques inférieurs donnent la contribution relative au courant des 25 émetteurs à  $E_{\text{lim}}$ . À  $d = 10 \mu\text{m}$ , l'écrantage est faible et n'a aucun effet visible sur la dispersion du renforcement de champ (cf. Fig. 6.16). Les graphiques 6.19a nous renseignent donc sur l'effet isolé de la statistique de croissance. Les graphiques 6.19b en revanche correspondent à un espacement du réseau de  $d = 2 \mu\text{m}$  pour lequel on a montré que l'écrantage accroît nettement la dispersion du renforcement de champ. Rappelons que pour les deux valeurs d'espacement, les 25 émetteurs sont inchangés (l'aléatoire est fixé après le tirage initial).

Dans les deux cas, on voit que l'émission est dominée par trois émetteurs, les numéros 9, 10 et 12 qui présentent globalement les facteurs d'aspect les plus grands. Deux différences valent toutefois la peine d'être notées.

- Premièrement, ce n'est pas le même émetteur qui contribue le plus au courant total dans les deux configurations. À  $d = 10 \mu\text{m}$ , l'ordre de contribution des émetteurs respecte le classement de leur facteur d'aspect :  $f_{10} = 316$ ,  $f_9 = 300$ , et  $f_{12} = 278$ . À  $d = 2 \mu\text{m}$ , cet ordre se retrouve bouleversé, témoignant de l'aléatoire supplémentaire induit par l'écrantage. En particulier, l'émetteur n°10 se retrouve dernier des trois à cause d'un écrantage plus important. Si cela pouvait être parfaitement lié au hasard, ce cas particulier est en fait biaisé ici puisque l'émetteur n°10 est un émetteur de bord. À cause de notre choix peu avisé de conditions aux limites miroir au lieu de véritables conditions périodiques, l'émetteur 10 se retrouve donc face à lui-même alors qu'il aurait pu avoir une chance de se retrouver devant un émetteur plus petit, et subir en conséquence un écrantage moindre.
- Deuxièmement, les trois émetteurs contribuent pour 58% du courant à  $d = 10 \mu\text{m}$ , indiquant une contribution non négligeable des autres émetteurs. On voit d'ailleurs sur le graphique de la température que plusieurs autres émetteurs ont déjà commencé à chauffer à  $E_{\text{lim}}$  et sur le graphique du courant que plus d'une dizaine d'émetteurs ne sont pas trop loin d'une contribution de 4%, attendue pour un réseau d'émetteurs identiques. Avec l'espacement de  $2 \mu\text{m}$  en revanche, l'accroissement de la dispersion du renforcement de champ se fait clairement sentir puisque les 22 émetteurs restants se partagent précisément la contribution que l'on attendrait d'un seul émetteur dans le cas d'un réseau identique (4%).

L'avantage d'une contribution mieux répartie à  $d = 10 \mu\text{m}$  est un courant total plus important ( $I_{\text{tot}} = 0.46 \text{ mA}$  contre  $0.29 \text{ mA}$  à  $d = 2 \mu\text{m}$ ) pour un champ appliqué plus simple à atteindre ( $E_{\text{lim}} = 40.4 \text{ MV/m}$  contre  $96.8 \text{ MV/m}$  à  $d = 2 \mu\text{m}$ ). En revanche, si la tension d'allumage plus élevée n'est pas un souci, mais que l'on veut maximiser la densité de courant macroscopique

$$\mathcal{J} = \frac{I_{\text{tot}}}{25d^2}, \quad (6.2)$$

alors la configuration à  $d = 2 \mu\text{m}$  est plus intéressante.

En fait, une étude plus détaillée de la densité de courant macroscopique en fonction du champ et de la distance (figure 6.20) montre que l'on gagne toujours à densifier le réseau si on n'a aucune contrainte sur le champ que l'on peut appliquer<sup>2</sup>. La figure ne montre pas comment évolue l'émission juste après  $E_{\text{lim}}$  puisqu'il faudrait pour cela préciser les conséquences de la destruction thermique d'un émetteur. En particulier, savoir quelle est la forme résiduelle de l'émetteur après destruction, et si cette destruction impacte les émetteurs voisins. Ces deux questions nécessiteraient une réponse expérimentale, qui risquerait par ailleurs de dépendre de l'espacement du réseau. Il faudrait ensuite que notre modèle recalculait l'électrostatique post-destruction pour pouvoir poursuivre le calcul de l'autoéchauffement, et ce à chaque destruction. Une telle étude contribuerait à mieux prévoir la durabilité de la source d'électrons et représente de ce fait une piste intéressante pour des travaux futurs.

Enfin, le graphique (b) de la figure 6.20 souligne l'évaluation assez peu précise de  $E_{\text{lim}}$  en montrant que la température maximale atteinte au champ limite fluctue d'une centaine de degrés en fonction

2. Dans les faits cependant, plus le champ global est élevé dans les situations expérimentales, plus il est probable qu'un détail expérimental non pris en compte par le modèle enclenche un claquage selon un des multiples scénarios décrit au chapitre 1, sous section 1.3

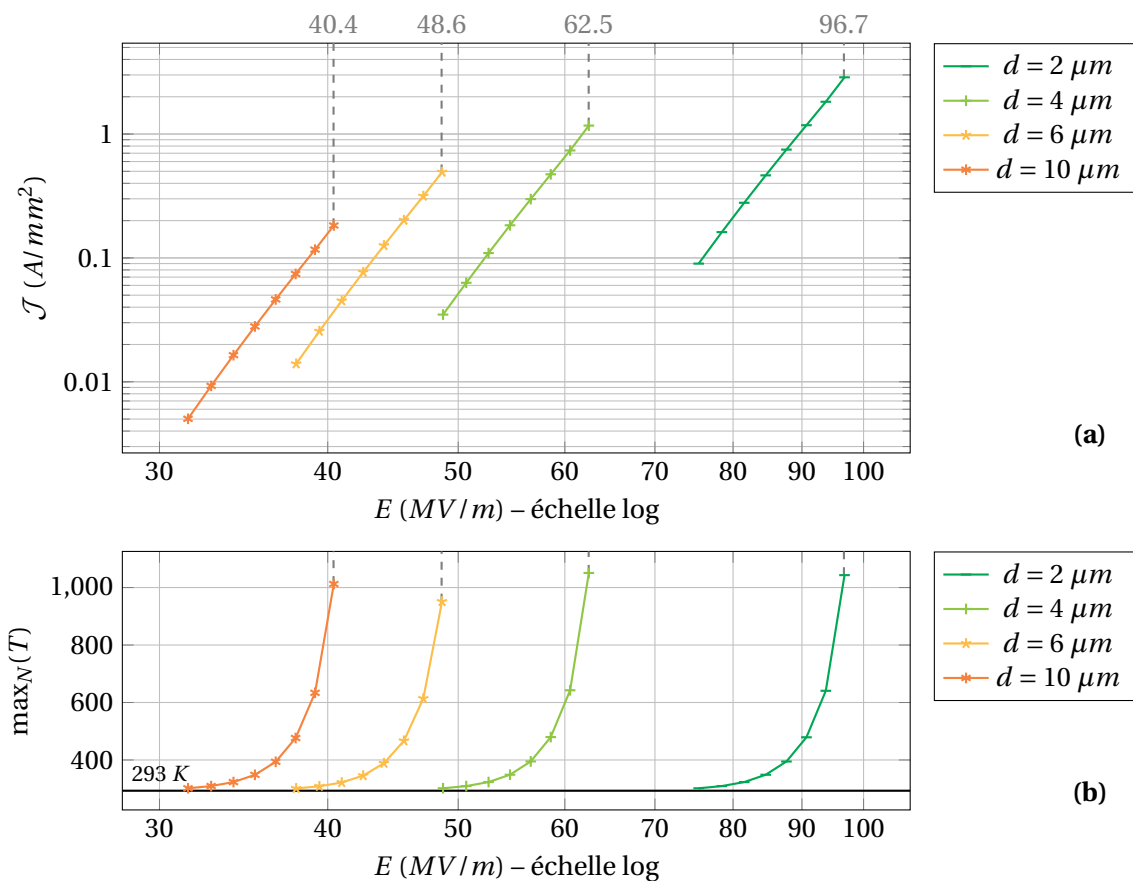


FIGURE 6.20 – Influence de l'espacement du réseau sur la caractéristique courant-tension jusqu'au champ limite  $E_{\text{lim}}$ , indiqué par les lignes grises en tiret. Les deux axes sont en échelles log. **(a)** : Variation de la densité de courant macroscopique  $\mathcal{J}$  avec le champ appliqué  $E$  (cf. Eq. 6.2). **(b)** : augmentation avec le champ de la température la plus élevée parmi les 25 émetteurs.



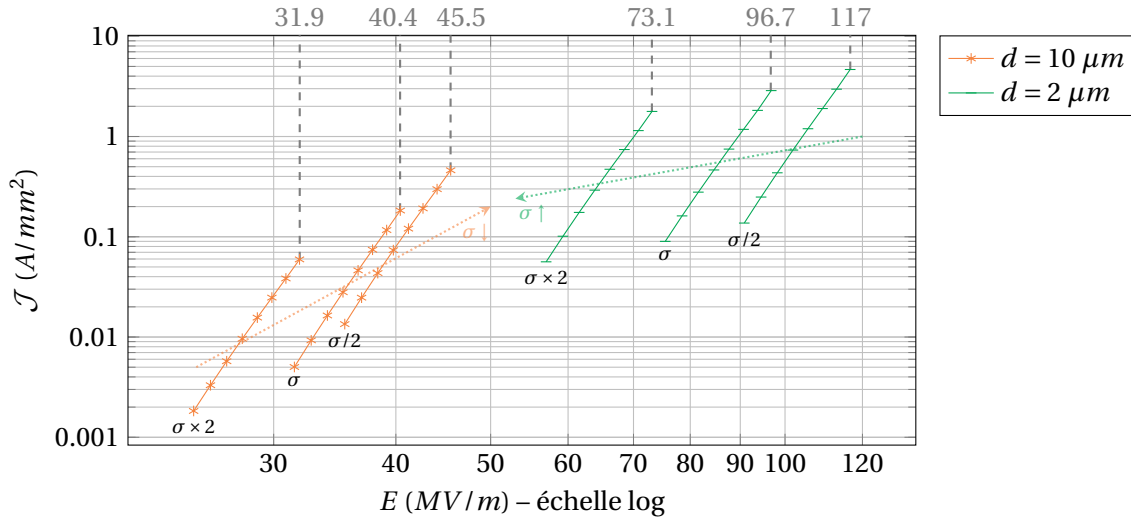


FIGURE 6.21 – Influence de l'amplitude de la statistique de croissance sur la caractéristique courant-tension à  $d = 2 \mu\text{m}$  et  $d = 10 \mu\text{m}$ . Plus précisément,  $\mathcal{J}$  est la densité de courant macroscopique (Eq. 6.2) et l'écart type de référence pour la hauteur et le rayon valent respectivement  $\sigma_H = 6.3\%$  et  $\sigma_{R_s} = 4.1\%$ .

de la distance. Ce détail induit une certaine incertitude qui n'a pas pu être proprement quantifiée ici, mais qu'il faut garder à l'esprit pour la comparaison des valeurs de  $J$  au champ limite. Ce point pourrait être amélioré en employant une recherche dichotomique du champ limite plutôt qu'un simple échantillonnage fixe du champ  $E$ .

### 6.3.3 Intérêt de la reproductibilité des émetteurs

Finissons ce chapitre en nous penchant sur l'influence directe de la dispersion de la statistique de croissance. Nous considérons pour ce faire deux nouveaux tirages de 25 émetteurs, respectivement avec une dispersion accrue et réduite :

- Pour le premier tirage, l'écart type sur la hauteur et le rayon sont augmentés d'un facteur 2,  $\sigma_H = 12.6\%$  et  $\sigma_{R_s} = 8.2\%$ .
- Pour le second tirage, l'écart type sur la hauteur et le rayon sont réduits d'un facteur 2,  $\sigma_H = 3.15\%$  et  $\sigma_{R_s} = 2.05\%$ .

La figure 6.21 montre la conséquence de ces changements sur la densité de courant macroscopique pour les cas d'un réseau d'espacement  $d = 10 \mu\text{m}$  et  $d = 2 \mu\text{m}$ . Dans les deux cas, réduire la dispersion géométrique des émetteurs permet d'obtenir un meilleur courant limite, au prix d'un champ d'allumage plus important. Le premier point s'explique par la contribution d'un plus grand nombre d'émetteurs à l'émission au champ limite. Le deuxième point traduit un facteur d'aspect maximal plus petit :  $\max_N(f) = 273$  pour  $\sigma/2$  contre  $\max_N(f) = 421$  pour  $\sigma \times 2$ .

Par ailleurs, si l'on compare cette tendance entre les deux espacements, on remarque que la réduction de la dispersion à  $d = 2 \mu\text{m}$  donne un gain en courant moindre et une augmentation du champ d'allumage plus importante qu'à  $d = 10 \mu\text{m}$ . Cela suggérerait que réduire l'amplitude de la statistique de croissance est moins bénéfique pour les réseaux denses qu'elle ne l'est pour les réseaux espacés. Vues sous un autre angle, les tendances de la figure 6.21 (flèches en pointillés de faible opacité) semblent indiquer l'existence d'un compromis entre densité de courant macroscopique et tension d'allumage qui correspondrait soit à un réseau très dense d'émetteurs très variables, soit à un réseau bien espacé d'émetteurs très reproductibles.

Pour confirmer cette suggestion, considérons la variation de la densité de courant  $\mathcal{J}_{\text{lim}}$  au champ limite avec l'espacement du réseau montré sur la figure 6.22. En comparant les courbes à  $\sigma \times 2$ ,  $\sigma$

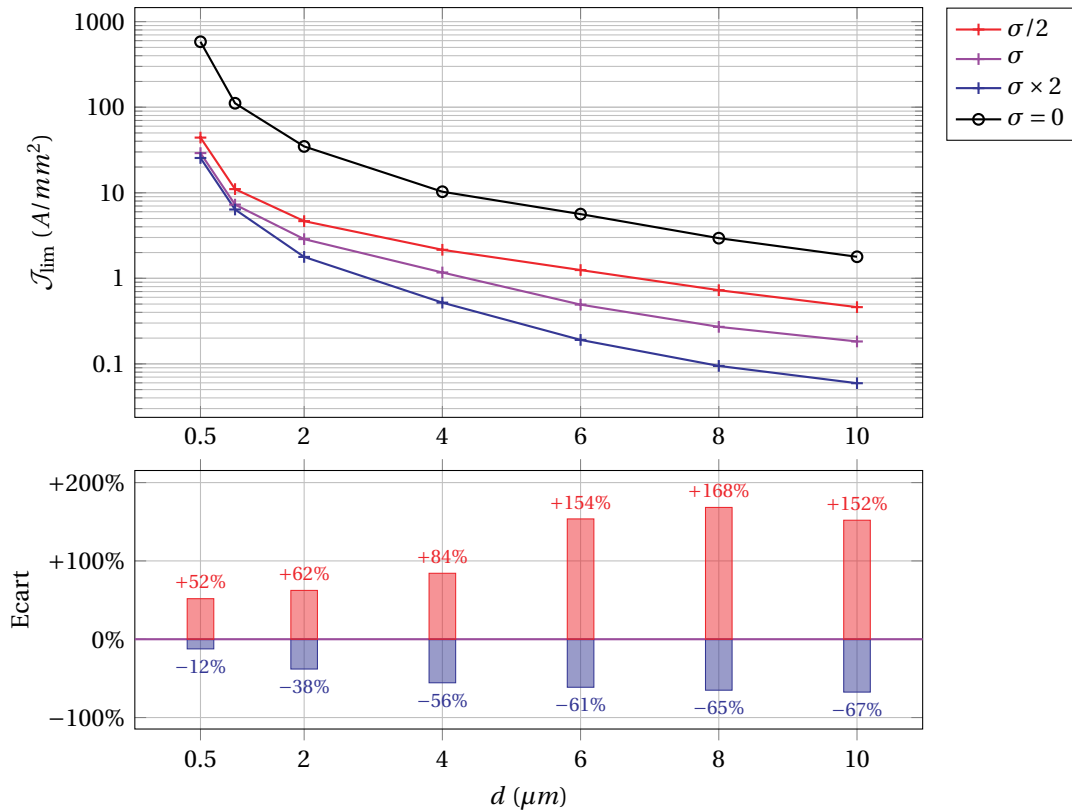


FIGURE 6.22 – Variation de la densité de courant macroscopique  $\mathcal{J}$  avec l'espacement du réseau pour différentes amplitudes de statistique de croissance. Le graphique inférieur renseigne l'écart relatif de la courbe à  $\sigma/2$  (en rouge) et de la courbe à  $\sigma \times 2$  (en bleu) avec la courbe de référence à  $\sigma$  (en violet).

et  $\sigma/2$  avec la courbe obtenue pour un réseau idéal d'émetteurs parfaitement identiques ( $\sigma = 0$ ), on voit qu'améliorer la reproductibilité des émetteurs est en effet plus avantageux pour les réseaux espacés que pour les réseaux denses. Pour quantifier cette assertion, le graphique inférieur indique que réduire d'un facteur 2 la dispersion géométrique offre un gain d'un facteur 3 sur  $\mathcal{J}_{\text{lim}}$  à  $d = 10 \mu\text{m}$  tandis que ce gain tombe à un facteur 1.5 à  $d = 0.5 \mu\text{m}$ . Ces résultats viennent appuyer les efforts faits par Thales pour contrôler autant que possible la statistique de croissance de ses émetteurs dans une optique de produire une source d'électron basée sur des réseaux réguliers peu denses de nanostructures, là où d'autres ont pris la direction des réseaux très denses et désordonnés de nanofils de carbone [31, 32] ou d'autres matériaux [33, 34, 35].

Cependant, s'il est facile d'ajouter la division d'une variable par deux dans un code de modélisation, améliorer la reproductibilité des émetteurs au cours du processus de croissance n'est pas une chose aisée. Malgré les bonnes performances obtenues à cet égard par les émetteurs Thales, la croissance par PECVD reste un processus hautement variable et il est certainement utopique d'espérer atteindre la reproductibilité parfaite. En ce sens, une solution alternative pourrait être l'intégration d'un contrôle individuel, actif ou passif, de la tension de chaque émetteur. Une possibilité serait par exemple de faire croître les nanostructures de carbone directement sur des plots de raccordements, disposés à la surface d'une couche de résistance de ballast pour homogénéiser l'émission [36, 37]. Une autre possibilité envisagée par Thales dès le début des années 2000 consiste à faire croître les émetteurs directement sur un saturateur de courant : une diode NIN qui consiste en une couche semi-isolante prise en sandwich entre deux couches négativement doppées de GaAs, le tout se comportant comme une faible résistance à faible champ et limitant drastiquement le nombre de porteur de charge au delà d'un champ seuil (saturation du courant) [38].

Dans cette direction, il serait tout à fait envisageable d'adapter notre modélisation pour intégrer

ces spécificités et ainsi continuer à dégager les grandes tendances qui pourraient préparer le terrain à de futures améliorations concrètes.

## 6.4 Conclusion

En se basant sur les mesures expérimentales de la géométrie des nanostructures développées par Thales, nous avons montré l'intérêt de notre algorithme de simulation 3D/2D pour mener des études poussées, combinant prise en compte des interactions électrostatiques en 3D et suivi de l'autoéchauffement des émetteurs.

La possibilité de suivre l'échauffement en 2D permet une analyse fine de son évolution temporelle. Nous avons ainsi pu proprement caractériser la transition des nanostructures vers un régime d'émission thermochamp s'achevant par une destruction thermique prématurée causée par l'emballement de l'effet Joule.

En fixant ensuite le champ limite de nos analyses juste avant destruction, nous avons pu comparer l'influence de la statistique de croissance sur les performances de l'émission. Une étude attentive de la montée en tension a montré que la dispersion des paramètres géométriques des émetteurs réduisait les performances de la source en concentrant l'émission sur quelques nanostructures capables d'émettre à un champ plus faible, car mieux profilées.

Grâce à la simplicité de notre algorithme 3D/2D, nous avons pu poursuivre l'analyse de la statistique de croissance pour différents espacements de réseau. Nos résultats ont montré que le bénéfice d'une bonne reproductibilité des émetteurs sur le courant était bien moindre pour les réseaux très denses que dans le cas des réseaux espacés limitant l'écrantage. Ce constat est venu confirmer l'intérêt d'opposer généralement deux types de FEA bien distincts : d'un côté les réseaux très denses d'émetteurs à géométrie très variable et de l'autre les réseaux bien espacés limitant l'écrantage entre des émetteurs très similaires.

De manière intéressante, nos résultats suggèrent que le stéréotype de ces deux types de réseau (très dense avec une forte dispersion géométrique versus bien espacé avec une bonne reproductibilité) pourrait *in fine* converger vers une caractéristique courant-tension assez similaire.

### Perspectives

Comme mentionné à quelques reprises au cours de ce chapitre, les résultats présentés ont été obtenus en fin de thèse, dans un temps assez limité. De nombreuses pistes d'améliorations peuvent donc être envisagées pour consolider les conclusions obtenues :

- Concernant la modélisation thermique des émetteurs, plusieurs études théoriques se sont intéressées aux propriétés plus spécifiques des semi-conducteurs et en particulier des nanotubes de carbone [16, 17, 18]. Intégrer ces spécificités tout en conservant l'avantage d'une résolution temporelle fine permettrait de se rapprocher des mesures expérimentales. Dans la même direction, prendre le temps de mieux simuler la géométrie creuse des nanostructures Thales pour bien rendre leur volume aurait certainement un impact non négligeable sur les prédictions thermiques, de même qu'une étude dédiée à l'influence de la conicité des émetteurs sur l'échauffement.
- Concernant l'étude de la statistique de croissance, il faudrait consolider les résultats soit en les répétant sur plusieurs tirages aléatoires de 25 émetteurs, soit en modélisant directement un plus grand échantillon (ce qui requerrait alors une gestion plus performante de la résolution 3D électrostatique, relativement gourmande en puissance de calcul pour un très grand nombre d'émetteurs). Dans les deux cas, il faudra alors veiller à intégrer de véritables conditions aux limites périodiques pour s'affranchir du biais d'écrantage des émetteurs de bord. Enfin, une mesure statistique du rayon à la base des nanostructures permettrait d'intégrer cette variation supplémentaire (dont l'impact sur l'échauffement plus que sur le renforcement de champ pourrait avoir un effet non négligeable).

## Références du chapitre 6

« [...] les paradigmes [sont] les découvertes scientifiques universellement reconnues qui, pour un temps, fournissent à une communauté de chercheurs des problèmes types et des solutions. »

– Thomas Khun

(La Structure des révolutions scientifiques, 1962)

- [1] I. BRODIE et C. A. SPINDT. « The application of thin-film field-emission cathodes to electronic tubes ». en. In : *Applications of Surface Science* 2.2 (jan. 1979), p. 149-163. ISSN : 0378-5963. DOI : [10.1016/0378-5963\(79\)90031-X](https://doi.org/10.1016/0378-5963(79)90031-X). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037859637990031X> (visité le 20/07/2021) (cf. p. 141).
- [2] WIKIPÉDIA. *Thales*. URL : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Thales> (visité le 04/11/2021) (cf. p. 141).
- [3] K. B. K. TEO et al. « Uniform patterned growth of carbon nanotubes without surface carbon ». en. In : *Applied Physics Letters* 79.10 (sept. 2001), p. 1534-1536. ISSN : 0003-6951, 1077-3118. DOI : [10.1063/1.1400085](https://doi.org/10.1063/1.1400085). URL : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1400085> (visité le 04/11/2021) (cf. p. 141).
- [4] THALES. *Radio frequency microwave sources*. URL : <https://www.thalesgroup.com/en/markets/market-specific-solutions/microwave-imaging-sub-systems/radio-frequency-microwave-sources-6> (visité le 04/11/2021) (cf. p. 141).
- [5] W. I. MILNE et al. « Carbon nanotubes as field emission sources ». en. In : *Journal of Materials Chemistry* 14.6 (2004), p. 933-943. DOI : [10.1039/B314155C](https://doi.org/10.1039/B314155C). URL : <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2004/jm/b314155c> (visité le 28/01/2019) (cf. p. 141, 143).
- [6] Eric MINOUX et al. « Achieving High-Current Carbon Nanotube Emitters ». en. In : *Nano Letters* 5.11 (nov. 2005), p. 2135-2138. ISSN : 1530-6984, 1530-6992. DOI : [10.1021/nl051397d](https://doi.org/10.1021/nl051397d). URL : <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/nl051397d> (visité le 11/03/2020) (cf. p. 141).
- [7] K B K TEO et al. « Plasma enhanced chemical vapour deposition carbon nanotubes/nanofibres how uniform do they grow? » en. In : *Nanotechnology* 14.2 (fév. 2003), p. 204-211. ISSN : 0957-4484. DOI : [10.1088/0957-4484/14/2/321](https://doi.org/10.1088/0957-4484/14/2/321). URL : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-4484/14/2/321> (visité le 04/11/2021) (cf. p. 141-145, 152).
- [8] Matthew T. COLE et al. « Deterministic Cold Cathode Electron Emission from Carbon Nanofibre Arrays ». en. In : *Scientific Reports* 4.1 (mai 2014). Number : 1 Publisher : Nature Publishing Group, p. 4840. ISSN : 2045-2322. DOI : [10.1038/srep04840](https://doi.org/10.1038/srep04840). URL : <https://www.nature.com/articles/srep04840> (visité le 05/01/2021) (cf. p. 141, 143, 144, 146, 152, 154).
- [9] Florian ANDRIANIAZY et al. « Quantitative characterization of field emission parameters : Application to statistical analysis of individual carbon nanotubes/nanofibers ». en. In : *J. Vac. Sci. Technol. B* 33.1 (2015), p. 9 (cf. p. 141).
- [10] S. H. JO et al. « Effect of length and spacing of vertically aligned carbon nanotubes on field emission properties ». In : *Applied Physics Letters* 82.20 (mai 2003). Publisher : American Institute of Physics, p. 3520-3522. ISSN : 0003-6951. DOI : [10.1063/1.1576310](https://doi.org/10.1063/1.1576310). URL : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1576310> (cf. p. 142).
- [11] F READ. « Field enhancement factors of one-dimensional and two-dimensional arrays of nanotubes ». en. In : *Microelectronic Engineering* 73-74 (juin 2004), p. 679-685. ISSN : 01679317. DOI : [10.1016/S0167-9317\(04\)00184-4](https://doi.org/10.1016/S0167-9317(04)00184-4). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167931704001844> (visité le 29/09/2021) (cf. p. 142).
- [12] G. S. BOCHAROV et A. V. ELETSKII. « Effect of Screening on the Emissivity of Field Electron Emitters Based on Carbon Nanotubes ». en. In : *Technical Physics* 50.7 (juill. 2005), p. 944-947. ISSN : 1063-7842, 1090-6525. DOI : [10.1134/1.1994978](https://doi.org/10.1134/1.1994978) (cf. p. 142).

- [13] Dohyung KIM, Jean-Eric BOURÉE et Sang Youl KIM. « Calculation of the Field Enhancement for a Nanotube Array and Its Emission Properties ». In : *Journal of Applied Physics* 105.8 (avr. 2009), p. 084315. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.3091282](https://doi.org/10.1063/1.3091282) (cf. p. 142).
- [14] Dan CAI et Lie LIU. « The Screening Effects of Carbon Nanotube Arrays and Its Field Emission Optimum Density ». en. In : *AIP Advances* 3.12 (déc. 2013), p. 122103. ISSN : 2158-3226. DOI : [10.1063/1.4841275](https://doi.org/10.1063/1.4841275) (cf. p. 142).
- [15] Nannan LI et al. « Study of the Electric Field Screening Effect for Field Emitter Arrays ». In : *Journal of the Korean Physical Society* 66.8 (avr. 2015), p. 1186-1191. ISSN : 0374-4884, 1976-8524. DOI : [10.3938/jkps.66.1186](https://doi.org/10.3938/jkps.66.1186) (cf. p. 142).
- [16] Kenneth A. DEAN, Timothy P. BURGIN et Babu R. CHALAMALA. « Evaporation of Carbon Nanotubes during Electron Field Emission ». en. In : *Applied Physics Letters* 79.12 (sept. 2001), p. 1873-1875. ISSN : 0003-6951, 1077-3118. DOI : [10.1063/1.1402157](https://doi.org/10.1063/1.1402157) (cf. p. 142, 162).
- [17] P. VINCENT et al. « Modelization of Resistive Heating of Carbon Nanotubes during Field Emission ». en. In : *Physical Review B* 66.7 (août 2002). ISSN : 0163-1829, 1095-3795. DOI : [10.1103/PhysRevB.66.075406](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.075406) (cf. p. 142, 162).
- [18] G. TRIPATHI et al. « Spatial Dependence of the Temperature Profile along a Carbon Nanotube during Thermal-Field Emission ». en. In : *Journal of Applied Physics* 128.2 (juill. 2020), p. 025107. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/5.0010990](https://doi.org/10.1063/5.0010990) (cf. p. 142, 151, 162).
- [19] Z. F. REN et al. « Synthesis of Large Arrays of Well-Aligned Carbon Nanotubes on Glass ». en. In : *Science* 282.5391 (nov. 1998), p. 1105-1107. ISSN : 0036-8075, 1095-9203. DOI : [10.1126/science.282.5391.1105](https://doi.org/10.1126/science.282.5391.1105). URL : <https://www.science.org/doi/10.1126/science.282.5391.1105> (visité le 04/11/2021) (cf. p. 142).
- [20] Matthieu MAUGER et Vu Thien BINH. « Vertically aligned carbon nanotube arrays for giant field emission displays ». en. In : *J. Vac. Sci. Technol. B* 24.2 (2006), p. 8 (cf. p. 142, 143).
- [21] Lucie SABAUT et al. « Electrostatic modeling of an in-plane gated field emission cathode ». en. In : *J. Vac. Sci. Technol. B* 34.2 (2016), p. 8 (cf. p. 143).
- [22] Pierre-Louis GAUTHERIN et al. « Commutable cold cathodes based on vertically aligned carbon nanotubes with a buried modulation electrode ». en. In : *2018 31st International Vacuum Nanoelectronics Conference (IVNC)*. Kyoto : IEEE, juill. 2018, p. 1-2. ISBN : 978-1-5386-5715-7 978-1-5386-5717-1. DOI : [10.1109/IVNC.2018.8520180](https://doi.org/10.1109/IVNC.2018.8520180). URL : <https://ieeexplore.ieee.org/document/8520180/> (visité le 12/03/2020) (cf. p. 143).
- [23] V. I. MERKULOV et al. « Patterned growth of individual and multiple vertically aligned carbon nanofibers ». en. In : *Applied Physics Letters* 76.24 (juin 2000), p. 3555-3557. ISSN : 0003-6951, 1077-3118. DOI : [10.1063/1.126705](https://doi.org/10.1063/1.126705). URL : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.126705> (visité le 06/11/2021) (cf. p. 144).
- [24] H. CUI, O. ZHOU et B. R. STONER. « Deposition of aligned bamboo-like carbon nanotubes via microwave plasma enhanced chemical vapor deposition ». en. In : *Journal of Applied Physics* 88.10 (nov. 2000), p. 6072-6074. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.1320024](https://doi.org/10.1063/1.1320024). URL : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1320024> (visité le 06/11/2021) (cf. p. 144).
- [25] Feng DING, Kim BOLTON et Arne ROSÉN. « Molecular dynamics study of bamboo-like carbon nanotube nucleation ». en. In : *Journal of Electronic Materials* 35.2 (fév. 2006), p. 207-210. ISSN : 0361-5235, 1543-186X. DOI : [10.1007/BF02692437](https://doi.org/10.1007/BF02692437). URL : <http://link.springer.com/10.1007/BF02692437> (visité le 06/11/2021) (cf. p. 144).
- [26] Yahachi SAITO. *Carbon Nanotube and Related Field Emitters : Fundamentals and Applications*. en. Google-Books-ID : s8Nhe1wMq7QC. John Wiley & Sons, oct. 2010. ISBN : 978-3-527-63210-7 (cf. p. 144).

- [27] Timothy D. BURCHELL et Tsvetoslav R. PAVLOV. « Graphite : Properties and Characteristics ». en. In : *Comprehensive Nuclear Materials*. Elsevier, 2020, p. 355-381. ISBN : 978-0-08-102866-7. DOI : [10.1016/B978-0-12-803581-8.11777-1](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.11777-1). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128035818117771> (visité le 08/10/2020) (cf. p. 144).
- [28] Igor S GRIGORIEV et Evgenii Zalmanovich MEILIKHOV. *Handbook of physical quantities*. English. OCLC : 32468733. Boca Raton : CRC Press, 1997. ISBN : 978-0-8493-2861-9 (cf. p. 145).
- [29] Wei WEI et al. « Tip Cooling Effect and Failure Mechanism of Field-Emitting Carbon Nanotubes ». In : *Nano Letters* 7.1 (déc. 2006), p. 64-68. ISSN : 1530-6984, 1530-6992. DOI : [10.1021/nl1061982u](https://doi.org/10.1021/nl1061982u) (cf. p. 151).
- [30] M. DIONNE, S. COULOMBE et J.-L. MEUNIER. « Energy exchange during electron emission from carbon nanotubes : Considerations on tip cooling effect and destruction of the emitter ». In : *Physical Review B* 80.8 (août 2009). Publisher : American Physical Society, p. 085429. DOI : [10.1103/PhysRevB.80.085429](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.085429). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.085429> (visité le 25/10/2021) (cf. p. 151).
- [31] J.-M. BONARD et al. « Tuning the Field Emission Properties of Patterned Carbon Nanotube Films ». In : *Advanced Materials* 13.3 (2001), p. 184-188. ISSN : 1521-4095. DOI : [10.1002/1521-4095\(200102\)13:3<184::AID-ADMA184>3.0.CO;2-I](https://doi.org/10.1002/1521-4095(200102)13:3<184::AID-ADMA184>3.0.CO;2-I). URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/1521-4095%28200102%2913%3A3%3C184%3A%3AAID-ADMA184%3E3.0.CO%3B2-I> (cf. p. 161).
- [32] V. KATO, T. CHOUHAN et S. NOGUCHI. « Field emission from optimized structure of carbon nanotube field emitter array ». en. In : *J. Appl. Phys.* (2016), p. 9 (cf. p. 161).
- [33] R. Z. ZHAN et al. « Fabrication of gated CuO nanowire field emitter arrays for application in field emission display ». en. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics : Materials, Processing, Measurement, and Phenomena* 28.3 (mai 2010), p. 558-561. ISSN : 2166-2746, 2166-2754. DOI : [10.1116/1.3428544](https://doi.org/10.1116/1.3428544). URL : <http://avs.scitation.org/doi/10.1116/1.3428544> (visité le 15/06/2020) (cf. p. 161).
- [34] Filippo GIUBILEO et al. « Field Emission from Self-Catalyzed GaAs Nanowires ». en. In : *Nanomaterials* 7.9 (sept. 2017), p. 275. ISSN : 2079-4991. DOI : [10.3390/nano7090275](https://doi.org/10.3390/nano7090275). URL : <http://www.mdpi.com/2079-4991/7/9/275> (visité le 25/03/2021) (cf. p. 161).
- [35] Yicong CHEN et al. « Recent Progress on ZnO Nanowires Cold Cathode and Its Applications ». en. In : *Nanomaterials* 11.8 (août 2021), p. 2150. ISSN : 2079-4991. DOI : [10.3390/nano11082150](https://doi.org/10.3390/nano11082150). URL : <https://www.mdpi.com/2079-4991/11/8/2150> (visité le 05/09/2021) (cf. p. 161).
- [36] K. J. LEE. *Current Limiting of Field Emitter Array Cathodes*. English. Rapp. tech. Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA, jan. 1986 (cf. p. 161).
- [37] Yonghai SUN, John T. W. YEOW et David A. JAFFRAY. « Design and Fabrication of Carbon Nanotube Field-Emission Cathode with Coaxial Gate and Ballast Resistor ». en. In : *Small* 9.20 (oct. 2013), p. 3385-3389. ISSN : 16136810. DOI : [10.1002/smll.201300553](https://doi.org/10.1002/smll.201300553). URL : <http://doi.wiley.com/10.1002/smll.201300553> (visité le 26/03/2021) (cf. p. 161).
- [38] Eric MINOUX et al. « Field Effect Device Comprising a Current Saturator Device ». FR2879343A1. Juin 2006 (cf. p. 161).



# Conclusion générale

*« Une seule partie de la physique occupe la vie de plusieurs hommes, et les laisse souvent mourir dans l'incertitude. »*

---

Voltaire  
(Éléments de la philosophie de Newton –  
1738)

Ce travail de thèse s'est concentré sur l'autoéchauffement de micro/nanostructures idéalisées induit par l'émission d'électrons par effet de champ.

Une large partie de sa contribution consiste en une analyse de résultats de modélisation visant à améliorer la compréhension des mécanismes à l'œuvre au cours de l'autoéchauffement. L'autre partie restante réside dans la mise en application de cette compréhension pour obtenir des prédictions plus concrètes.

Pour bien cadrer la portée des résultats présentés, il a été jugé nécessaire de rappeler en détail au chapitre 2 la physique et les hypothèses sous-jacentes du modèle et d'exposer ses avantages par rapport à d'autres travaux théoriques tout en précisant ses limites.

Si la pure émission de champ ne nécessite que la résolution de l'électrostatique pour déterminer l'amplitude de l'effet de pointe à la surface des émetteurs, l'autoéchauffement constitue un problème multiphysique plus complexe. Une première étude temporelle au chapitre 3 pour le cas particulier de deux émetteurs de taille différente a ainsi été l'occasion d'insister sur l'importance des rapports de surface sur volume dans la contribution relative des effets Joule et Nottingham et leur compétition dans le temps avec l'évacuation thermique. Nous avons montré que plus l'échelle des émetteurs est petite, plus l'évacuation thermique stabilise rapidement l'échauffement résistif, confirmant l'intérêt de réduire au maximum la taille des rugosités de surface pour améliorer la tenue haute tension des électrodes.

Fixant ensuite la hauteur des émetteurs, nous avons quantifié la contribution thermique au courant sur une large gamme de champ. Cette étude a permis de mettre en perspective l'influence de la température sur le courant à travers le cas particulier d'émetteurs hémipsoïdaux de différents facteurs d'aspect : sur toute la gamme de paramètres explorée, la température est clairement apparue comme un paramètre de second ordre devant le champ électrique. Toutefois l'intérêt de la modélisation thermique réside bien plus dans la capacité à prévoir le champ limite au-delà duquel l'intégrité de l'émetteur n'est plus assurée. En accord avec l'état de l'art sur le sujet, cette limite a été assimilée au champ au-delà duquel la température dépasse le point de fusion de l'émetteur. La définition de ce champ de préclaquage offre un critère efficace et autocohérent pour étudier l'influence limite des effets thermiques sur l'émission.

En explorant ainsi systématiquement l'intégralité du régime d'émission thermo-champ jusqu'au point de préclaquage, on a pu mettre à jour pour les métaux réfractaires une transition discontinue



entre deux types d'équilibre au passage d'une valeur de champ seuil. Cette discontinuité est liée à la rétroaction positive de la température sur l'effet Joule qui, dès lors qu'elle l'emporte sur la rétroaction négative de la température sur l'effet Nottingham et la dissipation thermique, permet l'enclenchement d'une instabilité thermique : c'est l'emballement du chauffage résistif. L'observation d'une bistabilité nécessite cependant que la rétroaction négative mentionnée plus haut finisse par l'emporter à nouveau et permette l'amortissement dans le temps de cet emballement. C'est ce que permet l'enfoncement du maximum de température par le passage à un effet Nottingham suffisamment refroidissant, raison pour laquelle nous proposons d'appeler ce mécanisme la bistabilité d'inversion Nottingham. Par ailleurs, une étude paramétrique a montré qu'une augmentation de la conductivité thermique accroît la discontinuité (favorise l'enclenchement de l'instabilité et/ou réduit son amortissement). Réduire l'autoéchauffement de l'émetteur à un problème 1D (voire 0D) pourrait permettre d'expliquer analytiquement ce comportement, contre-intuitif au premier abord. L'étude d'une configuration simplifiée constitue par ailleurs une perspective pertinente pour approfondir les modalités de cette bistabilité qui n'avait jusqu'ici jamais été mise en évidence.

En parallèle, l'étude de l'autoéchauffement à des températures particulièrement élevées a révélé dans certains cas une élévation notable de la température de la cathode autour de la base des émetteurs. Dans le cadre de l'émission depuis une assemblée d'émetteurs proches les uns des autres (comme c'est le cas pour les réseaux d'émetteurs à effet de champ ou pour une surface rugueuse présentant plusieurs sites émissifs proches), cette élévation de température à la base pourrait permettre un couplage thermique participant à accroître l'échauffement des émetteurs. Cette hypothèse a été explorée et quantifiée au chapitre 4 par le biais de simulations 3D. Les résultats ont montré la possibilité d'un couplage thermique contribuant pour une dizaine de pourcents au courant dans des configurations particulièrement favorables, impliquant une très grande proximité des émetteurs et un champ électrique suffisamment important pour compenser l'écrantage électrostatique et atteindre l'échauffement limite (juste avant de dépasser le point de fusion).

Par ailleurs, nous avons aussi mis à profit ces simulations 3D pour montrer comment ces configurations peuvent typiquement constituer un optimum d'émission pour les réseaux d'émetteurs soumis à des champs intenses. En fait, plusieurs études électrostatiques ont montré que les bénéfiques antagonistes d'une forte densité d'émetteur qui maximise le nombre de sites émissifs par unité de surface *versus* une faible densité d'émetteurs qui minimise l'écrantage mènent à l'existence d'un espacement optimal intermédiaire qui maximise la densité de courant macroscopique. Cet espacement optimal est trouvé d'autant plus petit que le champ que l'on applique est fort. Cependant, en prenant en compte l'autoéchauffement en géométrie 3D, nous avons montré que pour des champs intenses légèrement au-delà de la valeur de préclaquage pour un émetteur isolé, les optimums prédits mènent systématiquement à la destruction thermique des émetteurs. Émerge alors un nouveau type d'optimum qui consiste à trouver pour chaque valeur de champ *appliqué* au-delà du seuil l'espacement parfait qui maintient constant le champ *local* au sommet de chaque émetteur. Ce nouvel espacement, qui correspond finalement à la distance de préclaquage pour un champ appliqué donné, donne moins un optimum que la valeur maximale de densité de courant macroscopique que l'on peut extraire d'un réseau *sans causer son autodestruction*. Cet espacement de préclaquage diminuant bien plus rapidement pour des valeurs de champ plus fortes, il devient possible de déterminer la valeur de champ limite au-delà de laquelle même le réseau le plus dense possible (émetteurs au contact) émettrait jusqu'à sa destruction. Une fois de plus, la prise en compte de l'autoéchauffement permet de fixer de manière autocohérente une limite sur les gammes de champ à explorer.

C'est justement dans ces configurations limites que le couplage thermique peut contribuer de manière notable à l'émission. Dans toutes les autres configurations en revanche – et donc pour des valeurs de champ appliqué plus raisonnable – la contribution du couplage thermique a été trouvée négligeable. Par conséquent, dans la majeure partie des cas, la seule influence des émetteurs sur l'échauffement de leur voisin passe par l'écrantage électrostatique. Cette interaction ne concernant que la résolution stationnaire de l'équation de Laplace, nous avons alors mis au point au chapitre

5 une méthode de réduction de dimension permettant de simuler en 2D seulement l'échauffement de chaque émetteur de manière indépendante. Le passage d'une distribution de champ 3D à la surface de chaque émetteur à une distribution radiale que l'on peut donner en entrée de simulation 2D axisymétrique peut cependant être la source d'une erreur importante sur le courant (et donc sur l'échauffement). En utilisant la fonction de Lambert et l'équation de Fowler Nordheim, nous avons déterminé le champ électrique 2D qui minimise cette erreur à partir du calcul de la moyenne orthoradiale de la densité de courant en 3D. L'algorithme final de simplification permet de réduire la résolution 3D complète très lourde à une résolution 3D stationnaire suivi de  $N$  simulations temporelles en 2D –  $N$  étant le nombre d'émetteurs – avec un gain d'au moins un ordre de grandeur sur le temps de calcul sans perte de précision au-delà du pourcent sur le courant et la température.

Cet algorithme a ensuite été appliqué au chapitre 6 pour modéliser l'émission simultanée d'un grand nombre de nanostructures de carbone, reprenant les caractéristiques des émetteurs à effet de champ utilisé dans la source d'électron développée par Thales. L'intérêt majeur de la simplification 3D vers  $N \times 2D$  était alors de pouvoir intégrer dans la simulation une variation aléatoire des paramètres géométriques des émetteurs, tout en conservant un temps de résolution raisonnable permettant l'étude d'un grand nombre de configurations. En reprenant les résultats de mesures publiés par Thales, nous avons ainsi pu simuler la statistique de croissance des émetteurs, et en étudier l'influence sur la performance de la source. La modélisation de l'échauffement est centrale dans cette étude puisqu'elle permet de définir un champ limite d'opération auquel il devient possible de comparer les différentes configurations (ce champ limite est fixé à l'occurrence de la première destruction thermique). Comme attendu, les modélisations ont montré que plus la géométrie des émetteurs était statistiquement dispersée, moins la contribution au courant est homogène, ce qui résulte en une performance d'émission moindre. Ce constat est d'autant plus marqué dans les réseaux denses, pour lesquelles la statistique de croissance se combine avec celle d'un écrantage variable, dépendant de la géométrie des émetteurs voisins. Par manque de temps cependant, nous avons restreint notre étude à un échantillon unique de 25 émetteurs. L'analyse d'un échantillon plus grand ou de plusieurs échantillons différents de même taille aurait permis de pousser l'analyse plus loin, en explorant par exemple la possibilité de trouver un espacement optimal en fonction de la dispersion sur les paramètres géométriques des émetteurs.

En ce sens, la poursuite des applications offertes par la simplification 3D vers  $N \times 2D$  constituent une voie prometteuse pour la poursuite de travaux de modélisation futur concernant les réseaux d'émetteurs à effet de champ.



## Annexe A

# Détails sur la théorie de Sommerfeld

*Cette annexe détaille la théorie de Sommerfeld sous-jacente aux équations 2.5 et 2.6 introduite sans justification au chapitre 2.*

### Densité d'états accessibles

La théorie de Sommerfeld consiste à considérer les électrons de conduction comme un simple gaz parfait de fermions neutres piégés dans un puits de potentiel plat (d'énergie  $\epsilon_C$ ) dont on peut étudier le comportement à l'aide des théories de la physique statistique à l'équilibre et de la physique quantique. Sous ces hypothèses, l'état des  $N$  électrons de conduction dans un volume  $V = L^3$  peut être approximé par un unique déterminant de Slater décrivant un électron unique dans un potentiel bien choisi, selon la méthode de Hartree-Fock. La fonction d'onde de cet électron vérifie alors l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + \epsilon_C \psi(\vec{r}) = \epsilon \psi(\vec{r}) \quad (\text{A.1})$$

dont les solutions sont de la forme :

$$\psi_k(\vec{r}) = A \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad \text{avec} \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = 2m/\hbar(\epsilon - \epsilon_C) \quad (\text{A.2})$$

En imposant des conditions aux limites périodiques sur un cube de volume  $V = L^3$  pour représenter les symétries du cristal (volume du métal), on obtient

$$\psi_k(\vec{r} + L\vec{e}_x) = \psi_k(\vec{r} + L\vec{e}_y) = \psi_k(\vec{r} + L\vec{e}_z) = \psi_k(\vec{r}) \quad (\text{A.3})$$

ce qui nous donne la quantification des composantes du vecteur impulsion  $\vec{k}$  dans l'espace réciproque

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z, \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}^* \quad (\text{A.4})$$

et donc la quantification de l'énergie cinétique, qui se retrouve ainsi déterminée par trois entiers relatifs  $n_x$ ,  $n_y$  et  $n_z$  dont la donnée définit un état d'impulsion ou d'énergie.

Dans l'espace des impulsions (espace réciproque), chacun de ces états occupe un volume  $(2\pi/L)^3$ , comme représenté sur la figure A.1. Notons que l'on parle ici d'un volume dans l'espace des impulsions  $\vec{k}$ , c'est donc un "volume" en [impulsion<sup>3</sup>]. On peut se servir de cette représentation pour calculer le nombre d'états accessibles ayant une impulsion de norme donnée  $k$  à  $dk$  près. Une impulsion  $k$  fixée dans l'espace réciproque correspond à une sphère de rayon  $k$ . On a donc :

$$v(k)dk = \frac{\text{volume de la coquille}}{\text{volume d'un état}} \times (2s + 1) = \frac{4\pi k^2 dk}{8\pi^3/V} \times 2 = \frac{V k^2 dk}{\pi^2} \quad (\text{A.5})$$

où  $s$  est le spin des particules considérées et vaut donc 1/2 pour les électrons. Pris seul,  $v(k)$  est la densité d'états "radiale" dans l'espace des impulsions, homogène à une [impulsion<sup>-1</sup>]. Pour obtenir

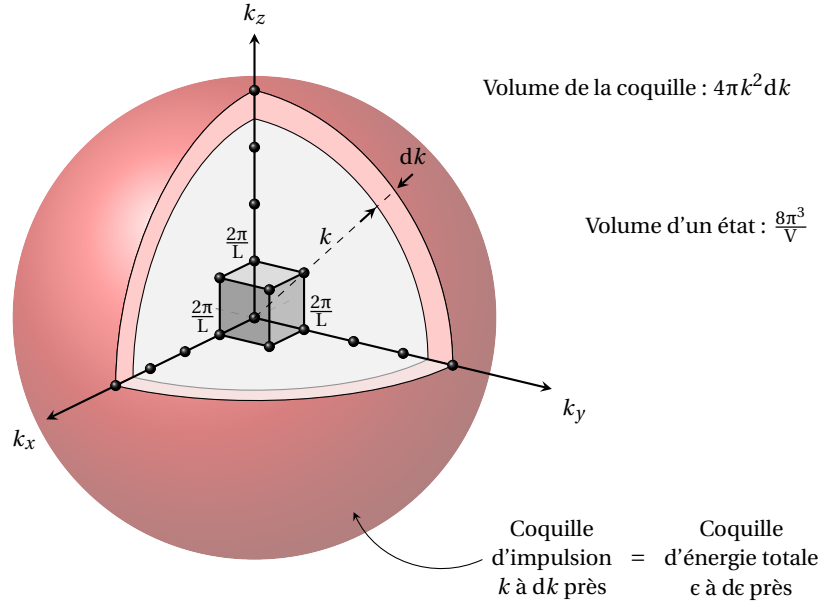


FIGURE A.1 – Représentation des états accessibles dans l'espace des impulsions. La coquille sphérique en rouge correspond aux états avec une impulsion de norme  $k$  à  $dk$  près. Les "volumes" sont ici en [impulsion<sup>3</sup>]

la densité d'états en énergie totale  $\epsilon$ , il suffit de rappeler que l'énergie cinétique  $\epsilon - \epsilon_C$  est en bijection avec l'impulsion :  $\hbar k = \sqrt{2m(\epsilon - \epsilon_C)}$ . On a par conséquent  $\nu(\epsilon)d\epsilon = \nu(k)dk$ , d'où il apparait :

$$\begin{aligned} \nu(\epsilon) &= \frac{Vk^2 dk}{\pi^2 d\epsilon} \\ &= \frac{V}{\pi^2} \times \frac{2m(\epsilon - \epsilon_C)}{\hbar^2} \times \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon - \epsilon_C}} \\ &= \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon - \epsilon_C} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

où  $m$  est la masse des électrons et  $V$  le volume du cube périodique.  $\nu(\epsilon)$  est donc la densité d'états accessibles à une énergie  $\epsilon$  donnée, homogène à une [énergie<sup>-1</sup>]. Pour obtenir la densité volumique d'états en énergie, c'est-à-dire le nombre d'états accessibles par unité de volume et unité d'énergie donnée en [longueur<sup>-3</sup> énergie<sup>-1</sup>], il suffit de diviser  $\nu(\epsilon)$  par  $V$ .

## Précisions sur la probabilité d'occupation de Fermi-Dirac

Les électrons étant des fermions, ils obéissent au principe d'exclusion de Pauli. Le nombre d'électrons occupant un niveau d'énergie  $\epsilon$  ne peut alors qu'être 1 ou 0 ce qui mène, sous l'hypothèse d'un gaz parfait, à la statistique de Fermi Dirac :

$$\bar{N}(\epsilon, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon - \mu(T)}{k_B T}\right)} \quad (\text{A.7})$$

où  $\bar{N}$  est le nombre moyen d'électron occupant le niveau d'énergie  $\epsilon$  (nécessairement inférieur ou égal à 1),  $k_B$  est la constante de Boltzmann, et  $\mu(T)$  est le potentiel chimique du gaz parfait qui modélise les électrons de conduction. Lorsque la température est nulle ( $T = 0$ ), le nombre moyen d'occupations  $\bar{N}$  vaut alors exactement 1 pour tous les niveaux d'énergie inférieurs à  $\mu(T = 0)$  et 0 pour ceux d'énergie supérieure. Le niveau pour lequel le nombre d'occupations passe de 1 à 0 est appelé *niveau de Fermi*  $\epsilon_F$ , et correspond donc à la valeur du potentiel chimique à température nulle  $\epsilon_F = \mu(T = 0)$ . Dans les faits cependant, la dépendance de  $\mu$  avec  $T$  est très faible et sa valeur ne s'écarte que très

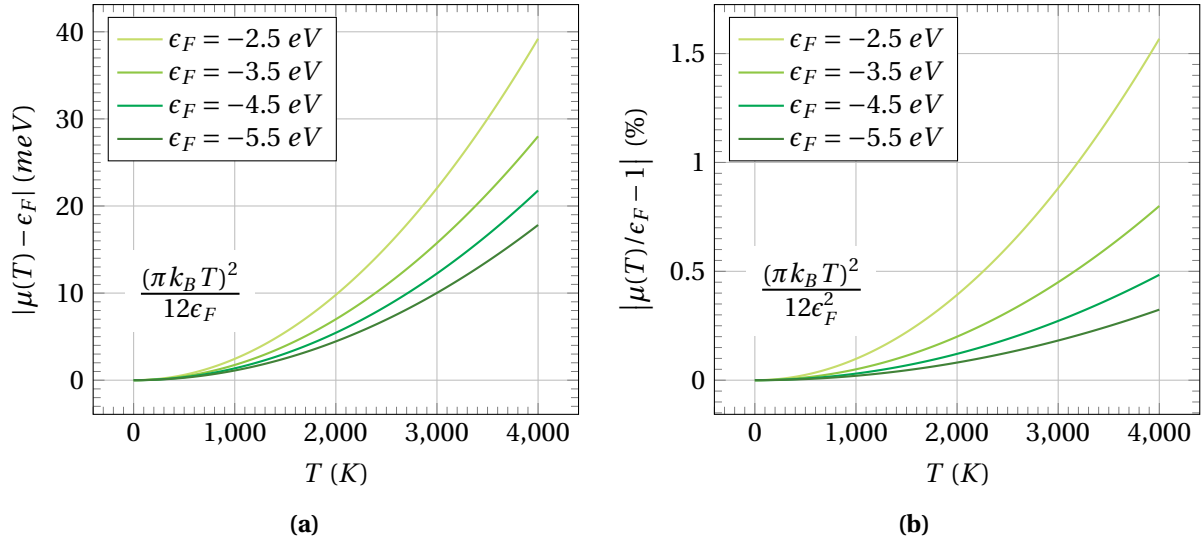


FIGURE A.2 – Différence entre le potentiel chimique  $\mu(T)$  et le niveau de Fermi  $\epsilon_F$  en fonction de la température. **(a)** : écart absolu (en  $meV$ ) et **(b)** : écart relatif (en %)

peu de  $\epsilon_F$  pour les températures usuelles. Par développement limité, on peut montrer [1] (*in ref.* Eq. 7.27) :

$$\mu(T) = \epsilon_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (\text{A.8})$$

La figure A.2 montre que pour des températures extrêmes de plusieurs milliers de Kelvin, l'écart entre  $\mu(T)$  et  $\epsilon_F$  atteint seulement quelques dizaines de milli-électrons-volts, inférieur au % pour les valeurs usuelles entre 4 et 5 eV. En se contentant d'une précision au dixième d'électron-volt sur le niveau de Fermi, on peut raisonnablement prendre  $\mu(T)$  égal à  $\epsilon_F$  dans les calculs.

On définit alors la différence d'énergie entre le niveau du vide et le niveau de Fermi comme le travail de sortie du métal (aussi appelé potentiel d'extraction) et noté usuellement  $\varphi$ . C'est en fait l'énergie minimale requise à température nulle pour pouvoir extraire un électron du métal. Sous notre hypothèse d'un potentiel chimique constant, le travail de sortie ne varie pas avec la température.

En fait, pour l'émission d'une pointe en tungstène de travail de sortie  $\varphi = 4.5$  eV à une température proche de 3500 K – le pire des cas explorés au cours de cette thèse – la formule A.8 donne un potentiel chimique 0.4% plus faible que  $\epsilon_F$ . La réduction de la densité de courant correspondante est de l'ordre de 3%. Cette erreur limite reste bien faible devant les autres sources d'incertitudes (lié aux hypothèses physiques) intervenant dans le calcul du courant et justifie que l'on prenne  $\varphi$  constant.

Lorsque le référentiel d'énergie est fixé de sorte que le niveau du vide soit d'énergie nulle, le travail de sortie  $\varphi$  n'est autre que  $-\epsilon_F$  et on ré-écrit la statistique de Fermi-Dirac dans la forme habituelle :

$$\bar{N}(\epsilon, T, \varphi) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon + \varphi}{k_B T}\right)} \quad (\text{A.9})$$

## Références

- [1] Jean-Marcel RAX. *Physique de la conversion d'énergie*. fr. EDP Sciences, mars 2015. ISBN : 978-2-7598-1754-2 (cf. p. 173).



## Annexe B

# Expression de la densité de courant émis et calcul de la fonction d'apport

Cette annexe définit le concept de fonction d'apport et établit la densité de courant sous la forme de l'équation 2.15 donnée au chapitre 2.

La contribution au courant dans la direction  $z$  d'un gaz d'électron par gamme d'impulsion comprise entre  $k_z$  et  $k_z + dk_z$  s'exprime

$$\frac{dJ}{dk_z} = -ef(k_z) \frac{\hbar k_z}{m} \times D(k_z, F) \quad (\text{B.1})$$

où  $f(k_z)$  est une distribution volumique d'impulsion en [ $\text{volume}^{-1} \cdot \text{impulsion}^{-1}$ ], de sorte que  $f(k_z)dk_z$  est la densité volumique en [ $\text{volume}^{-1}$ ] des électrons ayant une impulsion comprise entre  $k_z$  et  $k_z + dk_z$ .

La densité volumique d'électrons ayant une impulsion  $k_z = k_z^*$  à  $dk_z$  près correspond au produit :

$$f(k_z^*)dk_z = \bar{N}(\epsilon, T) \frac{v(k_z^*)}{V} dk_z \quad (\text{B.2})$$

où  $v(k_z^*)$  est la densité d'états accessibles à  $k_z^*$  en [ $\text{impulsion}^{-1}$ ], et  $\bar{N}(\epsilon, T)$  la probabilité de Fermi-Dirac d'occupation de ces états (cf. Eq. 2.6). À noter que cette dernière dépend toujours de l'énergie totale des électrons  $\epsilon$ .

Dans l'espace des impulsions  $\{k_x, k_y, k_z\}$ , le nombre d'états accessibles d'impulsion normale comprise entre  $k_z^*$  et  $k_z^* + dk_z$  correspond à l'ensemble des états appartenant au plan  $\{k_x, k_y\}$  d'épaisseur  $dk_z$  et coupant l'axe  $k_z$  en  $k_z^*$  (cf. Fig. B.1). Cela se traduit par la relation suivante :

$$\frac{v(k_z^*)}{V} dk_z = 2 \times \frac{\text{nombre d'états à } k_z^*}{\text{volume total}} = \frac{\text{volume du plan}}{\text{volume d'un état}} \times \frac{2}{\text{volume total}} \quad (\text{B.3})$$

Le facteur deux correspond à la prise en compte du spin 1/2 des électrons. Le volume d'un état dans l'espace des impulsions est  $(2\pi/L)^3$  (cf. annexe A).

Le plan  $\{k_x, k_y\}$  étant infini, le nombre d'états accessibles l'est aussi. En revanche, la probabilité d'occupation de chacun de ces états suivant une distribution de Fermi-Dirac, elle, est non nulle uniquement pour une partie d'entre eux. On a alors :

$$f(k_z)dk_z = \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) \frac{v(k_z)}{V} dk_z = \frac{\iint \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) dk_x dk_y}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} dk_z \times \frac{2}{V} \quad (\text{B.4})$$

En décrivant maintenant le plan  $\{k_x, k_y\}$  en coordonnées polaires  $\{k_p, \gamma\}$  dans le plan parallèle à l'interface,

$$\begin{aligned} k_p &= \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, & k_x &= k_p \cos(\gamma) \\ \gamma &= \arctan\left(\frac{k_y}{k_x}\right), & k_y &= k_p \sin(\gamma) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$



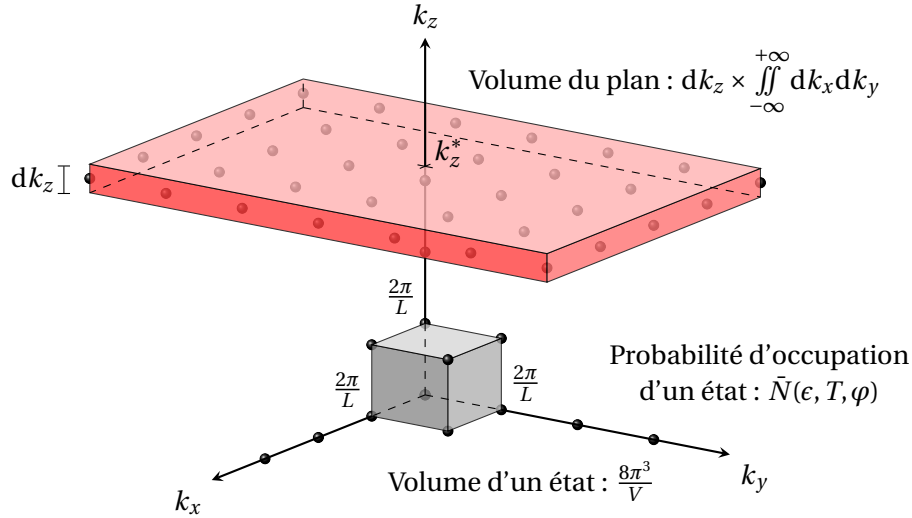


FIGURE B.1 – Représentation des états accessibles dans l'espace des impulsions. Le plan en rouge d'épaisseur  $dk_z$  englobe les états avec une impulsion selon  $z$  égale à  $k_z^*$  à  $dk_z$  près. Les "volumes" sont ici en [impulsion<sup>3</sup>].

et compte tenu de l'invariance en  $\gamma$ , on obtient (rappelons que  $V = L^3$ ) :

$$f(k_z) = \frac{1}{4\pi^3} \times 2\pi \int_0^{+\infty} \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) k_p dk_p \quad (\text{B.6})$$

Définissons ensuite l'énergie cinétique parallèle,

$$\epsilon_p = \hbar^2 k_p^2 / 2m = \hbar^2 (k_x^2 + k_y^2) / 2m \quad (\text{B.7})$$

pour finalement obtenir :

$$f(k_z) = \frac{4m}{h^2} \int_0^{+\infty} \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) d\epsilon_p \quad (\text{B.8})$$

On peut alors réécrire B.1 comme :

$$dJ = -e \frac{\hbar}{m} D(k_z, F) k_z \left( \frac{4m}{h^2} \int_0^{+\infty} \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) d\epsilon_p \right) dk_z \quad (\text{B.9})$$

Pour homogénéiser le formalisme, introduisons l'énergie normale

$$\epsilon_n = \epsilon_C + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (\text{B.10})$$

L'énergie totale (cf. Eq. 2.9) peut alors s'écrire :

$$\epsilon = \epsilon_n + \epsilon_p \quad (\text{B.11})$$

et on obtient la forme finale du courant en intégrant sur l'ensemble des énergies normales accessibles :

$$J(F, T) = -e \int_{\epsilon_C}^{+\infty} D(\epsilon_n, F) \left( \frac{4\pi m}{h^3} \int_{\epsilon_n}^{+\infty} \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) d\epsilon \right) d\epsilon_n \quad (\text{B.12})$$

On définit alors la fonction d'apport comme étant :

$$SF(\epsilon_n, T, \varphi) := \frac{4\pi m}{h^3} \int_{\epsilon_n}^{+\infty} \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) d\epsilon \quad (\text{B.13})$$

où la notation  $SF$  fait référence à *Supply Function* (fonction d'apport en anglais). Cette fonction d'apport est homogène à  $[\text{surface}^{-1} \cdot \text{temps}^{-1} \cdot \text{energie}^{-1}]$ . C'est bien une densité de flux d'électron à l'interface par unité d'énergie normale. La quantité  $SF(\epsilon_n, T, \varphi)d\epsilon_n$  correspond donc au nombre d'électrons qui arrive sur l'interface par unité de temps et de surface avec une énergie  $\epsilon_n$  à  $d\epsilon_n$  près.

En explicitant la probabilité de Fermi-Dirac, on a :

$$SF(\epsilon_n, T, \varphi) = \frac{4\pi m}{h^3} \int_{\epsilon_n}^{+\infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon + \varphi}{k_B T}\right)} d\epsilon \quad (\text{B.14})$$

En posant le changement de variable  $u = (\epsilon - \epsilon_F)/k_B T$  et en utilisant le fait que :

$$\int \frac{du}{1 + e^u} = u - \ln(1 + e^u) = \ln\left(\frac{1}{1 + e^{-u}}\right) = -\ln(1 + e^{-u}) \quad (\text{B.15})$$

on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{\epsilon_n}^{+\infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon + \varphi}{k_B T}\right)} d\epsilon &= k_B T \int_{\frac{\epsilon_n - \epsilon_F}{k_B T}}^{+\infty} \frac{du}{1 + e^u} \\ &= -k_B T \left[ \ln(1 + e^{-u}) \right]_{\frac{\epsilon_n + \varphi}{k_B T}}^{+\infty} \\ &= k_B T \cdot \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{\epsilon_n + \varphi}{k_B T}\right)\right) \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

D'où :

$$\boxed{SF(\epsilon_n, T, \varphi) = \frac{4\pi m k_B T}{h^3} \cdot \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{\epsilon_n + \varphi}{k_B T}\right)\right)} \quad (\text{B.17})$$



## Annexe C

# Méthode des charges images

*Cette annexe décrit le raisonnement par la méthode des charges images qui permet d'établir le potentiel perçu par un électron aux abords d'une surface conductrice du fait de la réflexion de son propre potentiel l'équation 2.17 introduite au chapitre 2.*

La méthode des charges images repose sur le théorème d'unicité de l'équation de Poisson : Pour une large classe de conditions aux bords<sup>1</sup> et une distribution de charge donnée dans la région d'intérêt, l'équation de Poisson peut avoir de nombreuses solutions, mais le gradient de chacune de ces solutions est le même. Autrement dit, le champ électrique effectif d'un électron aux abords d'un métal n'est déterminé que par la position exacte de cet électron par rapport à la surface et la condition aux bords correspondant aux propriétés du métal conducteur stipulant que le potentiel électrique à la surface du métal est uniforme. Le problème que nous cherchons à résoudre peut alors se résumer à la résolution de l'équation de Poisson dans la configuration illustrée par la figure C.1.

En se plaçant en coordonnées cylindriques  $(\rho, \phi, \zeta)$  (l'axe  $\zeta$  perpendiculaire à la surface passe par le centre des deux charges) le potentiel est alors la superposition du champ des deux charges d'amplitude  $q$  et  $-q$  :

$$V_{\text{im}}(\rho, \phi, \zeta) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{q}{\sqrt{\rho^2 + (\zeta - z)^2}} + \frac{-q}{\sqrt{\rho^2 + (\zeta + z)^2}} \right) \quad (\text{C.1})$$

où  $z$  est la distance entre la charge et la surface métallique. En réutilisant cette forme de  $V$  dans la configuration réelle (un électron face à la surface d'un conducteur métallique), on peut alors en déduire la densité surfacique de charge  $\sigma$  correspondante :

$$\sigma(\rho) = -\epsilon_0 \left. \frac{\partial V_{\text{im}}}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=0} = \frac{-qz}{2\pi(\rho^2 + z^2)^{3/2}} \quad (\text{C.2})$$

D'où on peut enfin déterminer la contribution de la surface métallique au potentiel électrique ressenti par un électron de charge  $-e$  à une distance  $z$  :

$$V_{\text{surf}}(z) = \frac{\sigma(\rho=0)}{4\epsilon_0} z = \frac{e}{16\pi\epsilon_0 z} \quad (\text{C.3})$$

En ajoutant à ce potentiel image celui lié à la valeur locale du champ  $F$ , on obtient alors la formule suivante pour la barrière de potentiel vu par un électron unique à une distance  $z$  de la cathode :

$$\mathcal{E}(z > 0) = -eFz - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} \quad (\text{C.4})$$

---

1. En particulier celle qui nous intéresse : condition de Dirichlet qui impose le potentiel électrique à être uniforme à la surface d'un métal.

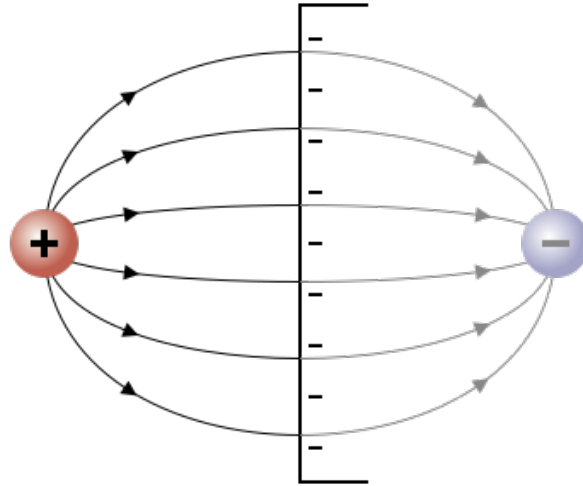


FIGURE C.1 – Champ électrique d'une charge positive à la surface d'un conducteur déterminé selon la méthode des charges images. Remarquons que l'intégrale de la distribution surfacique de charge à la surface vaut la valeur de la charge miroir. Crédit : [wikipedia](#).

où l'on distingue la barrière triangulaire  $\mathcal{E}_{\text{tri}} = -eFz$  de la modification due à la charge image  $\mathcal{E}_{\text{im}} = -e^2/16\pi\epsilon_0 z$ .

Le sommet de cette barrière de potentiel est alors atteint en

$$z^* = \sqrt{\frac{e}{16\pi\epsilon_0 F}} \quad (\text{C.5})$$

et vaut

$$\mathcal{E}(z^*) = \mathcal{E}_{\text{max}} = -\sqrt{\frac{e^3 F}{4\pi\epsilon_0}} \quad (\text{C.6})$$

Remarquons par ailleurs qu'aucun effet de la courbure de l'interface métal-vide n'est ici pris en compte alors même que la surface d'émission qui nous intéresse sera justement le sommet courbé d'une aspérité. En fait, il a été montré que les effets de courbures influencent nettement la forme de la barrière de potentiel pour des rayons de courbure inférieurs à deux dizaines de nanomètres [1] (*in ref.* Fig. 2), tout juste à la limite du plus petit rayon de courbure exploré dans cette thèse.

## Références de l'annexe C

- [1] A. KYRITSAKIS et J. P. XANTHAKIS. « Extension of the General Thermal Field Equation for Nano-sized Emitters ». In : *Journal of Applied Physics* 119.4 (jan. 2016), p. 045303. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.4940721](https://doi.org/10.1063/1.4940721) (cf. p. 180).

## Annexe D

# Détail du calcul du coefficient de transmission

Cette annexe détaille le calcul du coefficient de transmission introduit par l'équation 2.15 au chapitre 2.

L'équation de Schrodinger indépendante du temps s'écrit :

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{D.1})$$

Pour un électron d'énergie normal  $\epsilon_n$ , cette équation se traduit dans l'espace des positions à une dimension ( $z > 0$ ) par :

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon_n - \mathcal{E}(z))\psi(z) = 0 \quad (\text{D.2})$$

où l'on a utilisé l'expression du Hamiltonien dans l'espace des positions

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + \mathcal{E}(z) \quad (\text{D.3})$$

avec  $\mathcal{E}$  le paysage d'énergie potentiel le long de  $z$ . En réécrivant l'équation à partir de l'impulsion normale

$$\begin{aligned} \hbar k_z(z) &= \sqrt{2m(\epsilon_n - \mathcal{E}(z))} \\ &= \sqrt{2m\left(\epsilon_n + \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} + eFz\right)} \\ &= \sqrt{\frac{2m}{z}\left(eFz^2 + \epsilon_n z + \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0}\right)} \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

on obtient :

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - k_z(z)^2\psi(z) = 0 \quad (\text{D.5})$$

Le coefficient de transmission  $D$  d'un électron est alors défini à partir du courant de probabilité  $Y$  associé à sa fonction d'onde  $\psi$  :

$$Y(z) = \frac{-i\hbar}{2m} \left[ \psi^*(z) \frac{\partial\psi(z)}{\partial z} - \psi(z) \frac{\partial\psi^*(z)}{\partial z} \right] \quad (\text{D.6})$$

Plus précisément, le coefficient de transmission s'exprime comme le rapport du courant de probabilité transmis dans le vide  $Y_{\text{trans}}$  défini au-delà de la barrière de potentiel ( $z > \Delta z(\epsilon_C)$ ) sur le courant de probabilité incident  $Y_{\text{inc}}$  défini dans le métal en amont de la barrière ( $z < 0$ ) :

$$D(\epsilon_n, F) := \frac{Y_{\text{trans}}}{Y_{\text{inc}}} \quad (\text{D.7})$$

pour un électron d'énergie normale  $\epsilon_n$  arrivant sur une barrière de Schottky-Nordheim associé à une amplitude de champ  $F$ .

On utilise alors l'approximation de Kemple (suivant le formalisme détaillé dans l'article [1] et repris plus tard par Miller et Good [2] sous le nom d'approximation BKW 1D parabolique) pour obtenir le coefficient de transmission :

$$D(\epsilon_n, F) = \frac{1}{1 + \exp\left(-2i \int_{z_1}^{z_2} k_z(z) dz\right)} \quad (\text{D.8})$$

où les bornes de l'intégrale  $z_1$  et  $z_2$  sont deux zéros de l'impulsion normale :

$$k_z(z_1) = k_z(z_2) = 0 \quad (\text{D.9})$$

Elles correspondent donc aux solutions de l'équation  $k_z(z) = 0$ , équivalente à (cf. Eq. D.4) :

$$eFz^2 + \epsilon_n z + \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0} = 0 \quad (\text{D.10})$$

Le discriminant de cette équation du second degré vaut

$$\Delta = \epsilon_n^2 - \frac{e^3 F}{4\pi\epsilon_0} = \epsilon_n^2(1 - y^2) \quad (\text{D.11})$$

où l'on a introduit

$$y = \frac{1}{|\epsilon_n|} \sqrt{\frac{e^3 F}{4\pi\epsilon_0}} = \left| \frac{\mathcal{E}_{\max}}{\epsilon_n} \right| \quad (\text{D.12})$$

Le rapport  $y$  correspond au ratio entre le sommet de la barrière et l'énergie normale d'un électron incident. On peut alors distinguer trois cas, illustrés sur la figure D.1.

**Premier cas :** Pour les électrons arrivant avec une énergie normale en deçà du sommet de la barrière, on a  $|\epsilon_n| \geq |\mathcal{E}_{\max}|$  donc  $y \leq 1$ . Les racines  $z_1$  et  $z_2$  sont donc réelles :

$$z_{1,2} = \frac{-\epsilon_n}{2eF} \left(1 \pm \sqrt{1 - y^2}\right) \quad (\text{D.13})$$

En écrivant l'équation D.4 sous la forme factorisée

$$\hbar^2 k_z^2 = \frac{2m}{z} eF(z - z_1)(z - z_2) \quad (\text{D.14})$$

on voit que  $k_z^2$  apparait négatif lorsque  $z$  est pris entre les bornes  $z_1$  et  $z_2$ , ce qui implique que  $k_z$  est imaginaire pur :

$$\begin{aligned} \hbar k_z(z) &= i \left| \frac{2m}{z} eF(z - z_1)(z - z_2) \right|^{\frac{1}{2}}, \quad z_1 < z < z_2 \\ &= i \left| 2m \left( \epsilon_n + \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} + eFz \right) \right|^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

L'exposant de l'exponentielle de l'équation D.8 est par conséquent réel :

$$-2i \int_{z_1}^{z_2} k_z(z) dz = -2i \times \frac{i}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} \left| 2m \left( \epsilon_n + \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} + eFz \right) \right|^{\frac{1}{2}} dz \quad (\text{D.16})$$

**Deuxième cas :** Pour les énergies normales supérieures au-delà du sommet de la barrière, on a  $|\epsilon_n| < |\mathcal{E}_{\max}|$  donc  $y > 1$ . Les racines  $z_1$  et  $z_2$  sont dans ce cas complexes conjugués :

$$\begin{aligned} z_{1,2} &= a \pm ib \\ &= \frac{-\epsilon_n}{2eF} \left(1 \pm i \sqrt{y^2 - 1}\right) \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

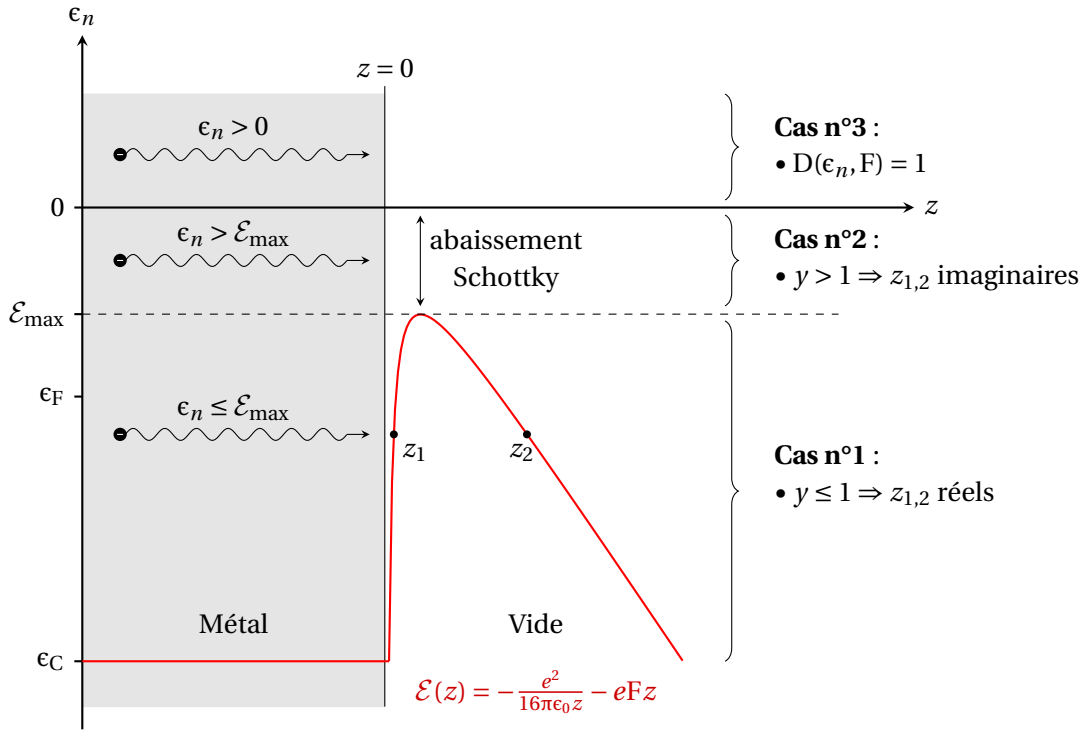


FIGURE D.1 – Schéma des trois cas considérés dans le calcul du coefficient de transmission, selon que les électrons arrivent à l’interface avec une énergie en deçà du maximum de la barrière (cas n°1) ou au-dessus (cas n°2). Le cas n°3 correspond à un électron arrivant qui arriverait avec une énergie déjà supérieur au niveau du vide.  $z_1$  et  $z_2$  sont les deux zéros de l’impulsion normale (cf. Eq. D.4).

L’équation D.14 peut alors s’écrire

$$\begin{aligned} \hbar k_z(z) &= \sqrt{\frac{2m}{z} eF(z - a - ib)(z - a + ib)} \\ &= \sqrt{\frac{2m}{z} eF [(z - a)^2 + b^2]} \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

ce qui donne une impulsion réelle. En revanche, ses deux bornes étant désormais complexes, l’intégral de l’équation D.8 se calcule le long d’un chemin dans le plan complexe. Comme ces bornes sont complexes conjuguées, le résultat de l’intégration donne un imaginaire pur. L’exposant de l’exponentielle est par conséquent réel dans ce cas aussi :

$$-2i \int_{z_1}^{z_2} k_z(z) dz = -2i \times i \operatorname{Im} \left( \int_{a-ib}^{a+ib} \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \left( \epsilon_n + \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} + eFz \right)} dz \right) \quad (\text{D.19})$$

Faisons alors le changement de variable

$$\rho = \frac{2eF}{-\epsilon_n} z, \quad d\rho = \frac{2eF}{-\epsilon_n} dz \quad (\text{D.20})$$

Les racines deviennent :

$$\rho_{1,2} = \frac{2eF}{-\epsilon_n} z_{1,2} = \begin{cases} 1 \pm \sqrt{1 - y^2}, & \text{si } y \leq 1 \\ 1 \pm i\sqrt{y^2 - 1}, & \text{si } y > 1 \end{cases} \quad (\text{D.21})$$

Et on peut réécrire l’intégrande des équations D.16 et D.19 de sorte que l’exposant de l’exponen-



tielle devient :

$$-2i \int_{z_1}^{z_2} k_z(z) dz = \begin{cases} \frac{m^{\frac{1}{2}} |\epsilon_n|^{\frac{3}{2}}}{eF} \int_{1-\sqrt{1-y^2}}^{1+\sqrt{1-y^2}} |\rho - 2 + y^2 \rho^{-1}|^{\frac{1}{2}} d\rho & \text{si } y \leq 1 \\ \frac{m^{\frac{1}{2}} |\epsilon_n|^{\frac{3}{2}}}{eF} \operatorname{Im} \left( \int_{1-i\sqrt{y^2-1}}^{1+i\sqrt{y^2-1}} |\rho - 2 + y^2 \rho^{-1}|^{\frac{1}{2}} d\rho \right) & \text{si } y > 1 \end{cases} \quad (\text{D.22})$$

En réinsérant ces formules dans l'équation D.8, on obtient la forme finale du coefficient de transmission tel qu'utilisé dans notre modèle :

$$D(\epsilon_n, F) = \left[ 1 + \exp \left( \frac{4\sqrt{2m} |\epsilon_n|^{\frac{3}{2}}}{3\hbar eF} v(y) \right) \right]^{-1} \quad (\text{D.23})$$

souvent écrite sous la forme :

$$D(\epsilon_n, F) = \frac{1}{1 + \exp \left[ \frac{4\sqrt{2}}{3} (4\pi\epsilon_0)^{-\frac{3}{4}} \left( \frac{m^2 e^5}{\hbar^4 F} \right)^{\frac{1}{4}} y^{-\frac{3}{2}} v(y) \right]} \quad (\text{D.24})$$

où la principale difficulté a été insérée dans la fonction  $v(y)$  :

$$v(y) = \frac{3}{4\sqrt{2}} \int_{\rho_1}^{\rho_2} |\rho - 2 + y^2 \rho^{-1}|^{\frac{1}{2}} d\rho \quad (\text{D.25})$$

Cette fonction peut être calculée à l'aide des intégrales elliptiques complètes de première et seconde espèce [3] :

$$K_1(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} d\theta \quad (\text{D.26})$$

$$K_2(k) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta} d\theta \quad (\text{D.27})$$

et on obtient alors

$$v(y) = \begin{cases} \sqrt{1+y} \left[ K_2 \left( \sqrt{\frac{1-y}{1+y}} \right) - y K_1 \left( \sqrt{\frac{1-y}{1+y}} \right) \right] & \text{si } y \leq 1 \\ -\sqrt{\frac{y}{2}} \left[ (1+y) K_1 \left( \sqrt{\frac{y-1}{2y}} \right) - 2 K_2 \left( \sqrt{\frac{y-1}{2y}} \right) \right] & \text{si } y > 1 \end{cases} \quad (\text{D.28})$$

que l'on peut aujourd'hui aisément calculer compte tenu de la littérature mathématique concernant  $K_1$  et  $K_2$  (voir par exemple [4]). En ce qui nous concerne, notre code d'émission est écrit en Fortran et nous avons utilisé les algorithmes proposés dans [5], section 6.11.

Notons que lorsque  $\epsilon_n$  tend vers 0,  $y$  lui tend vers l'infini et le coefficient de transmission évolue vers 1. Ainsi, l'équation D.23 n'est plus utilisable pour  $\epsilon_n > 0$ . Il faut donc isoler un troisième cas (cf. Fig. D.1).

**Troisième cas** : la barrière d'énergie potentielle est totalement transparente pour les électrons incidents qui ont une énergie normale au-dessus du niveau du vide.

$$D(\epsilon_n, F) = 1 \quad \text{si } \epsilon_n > 0 \quad (\text{D.29})$$

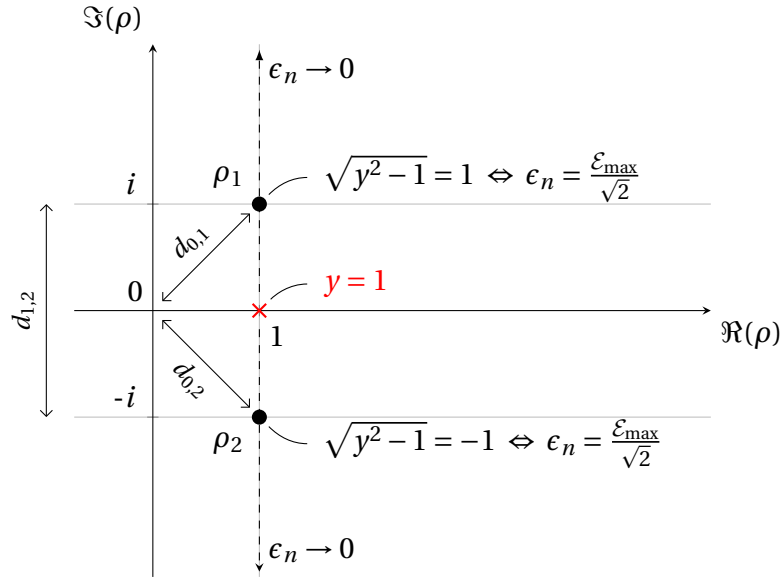


FIGURE D.2 – Position dans le plan complexe des racines  $\rho_1$  et  $\rho_2$  dans le deuxième cas (énergie normale au-dessus du sommet de la barrière :  $y > 1$ ).  $d_{1,2}$  est la distance entre les deux racines, et  $d_{0,1}$  (respectivement  $d_{0,2}$ ) est la distance entre l'origine et la racine  $\rho_1$  (respectivement  $\rho_2$ ). Les racines sont envoyées vers l'infini lorsque l'énergie normale  $\epsilon_n$  tend vers 0 ( $y$  tend vers l'infini).

Finissons par une précision conceptuelle importante bien qu'ayant un impact négligeable sur la valeur finale de la densité de courant. L'équation D.8 étant basée sur une approximation BKW 1D parabolique [1], Murphy et Good précisent dans leur article de 1956 [6] que sa validité s'efface à mesure que la distance entre les bornes d'intégrations (les zéros de l'impulsion normale) devient de l'ordre de la distance entre l'origine et les racines :

« This formula [Eq. D.8] was first proposed by Kemble [1] and also can be understood in terms of a parabolic WKB-type approximation. It applies to the case of a simple potential barrier for which  $k(z)$  [Eq. D.4] has two zeros, possibly complex, **and is not expected to be valid if  $k(z)$  has any other zeros or singularities in their vicinity.** [...] Since, as far as the actual potential  $\mathcal{E}(z)$  is concerned, the singularity at the origin does not apply, [Eq. D.8] **should no longer be used when the origin is close to the other singularities relative to the distance between them.** » [6] (in ref. section II)

Les auteurs préconisaient alors de s'imposer une limite  $\epsilon_n^\ell$  sur l'énergie normale au-delà de laquelle on se contente de supposer le coefficient de transmission égal à 1. Cette énergie limite est fixée à partir de la condition

$$\sqrt{y^2 - 1} = 1 \Rightarrow \epsilon_n^\ell = \frac{\mathcal{E}_{\max}}{\sqrt{2}} = -\sqrt{\frac{e^3 F}{8\pi\epsilon_0}} \quad (\text{D.30})$$

condition à laquelle la distance  $d_{1,2}$  entre les deux racines  $\rho_1$  et  $\rho_2$  dans le plan complexe illustré sur la figure D.2 devient du même ordre de grandeur que leur distance  $d_{0,1}$  et  $d_{0,2}$  avec l'origine, ce dernier présentant une singularité pour  $\mathcal{E}(z)$ . Bien que raisonnable, cette recommandation introduit une discontinuité peu physique, alors même qu'on trouve numériquement que l'expression D.23 est une fonction continue qui tend naturellement vers 1 lorsque  $\epsilon_n$  tend vers 0 (cf. Fig. 2.9). Cette expression n'est plus "valide" au-delà  $\epsilon_n^\ell$  mais d'un point de vue pragmatique, elle ne l'est pas moins que le passage abrupt à une transparence totale ( $D = 1$  pour  $\epsilon_n > \epsilon_n^\ell$ ).

En fait, en utilisant une méthode numérique plus lourde suivant un schéma de résolution type Numerov (wikipedia), Teste et Charbrerie [7] ont montré que le coefficient de transmission au-delà du sommet de la barrière évolue vers 1 en adoptant un comportement oscillatoire qui n'est de fait pas dé-

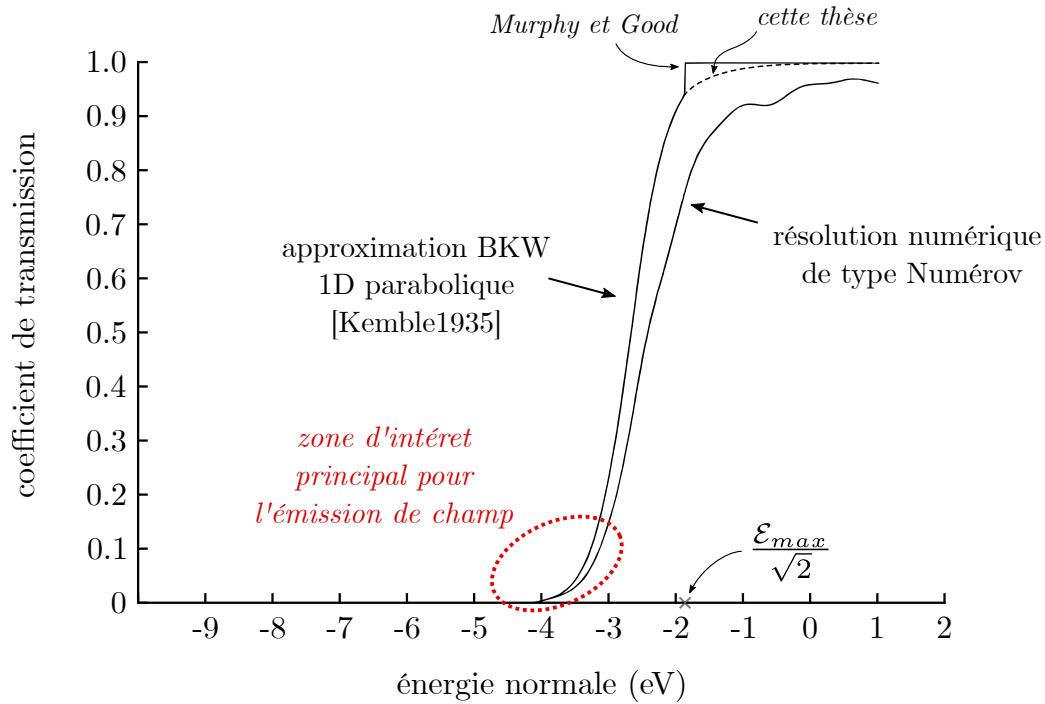


FIGURE D.3 – Comparaison du coefficient de transmission à  $F = 5 \text{ GV/m}$  entre le calcul numérique avec approximation BKW et la résolution numérique par une méthode de type Numerov. La figure illustre surtout la différence entre l'utilisation de la formule BKW jusqu'aux énergies normales nulles (cette thèse) *versus* la discontinuité à  $\epsilon_n^\ell = \mathcal{E}_{\max}/\sqrt{2}$  préconisée par Murphy et Good. La zone d'intérêt mis en évidence par les pointillés rouges est davantage visible sur la figure 2.10. Figure reproduite à partir de [7] (*in ref.* Fig. 4a).

crit par l'approximation de Kemble (BKW 1D parabolique). Toutefois, la comparaison des courbes sur la figure D.3 montre que conserver l'équation D.23 jusqu'à  $\epsilon_n = 0$  n'induit pas une erreur plus grande que d'imposer une discontinuité en  $\epsilon_n^\ell$ . Par ailleurs, on voit que la différence entre notre choix et la recommandation de Murphy et Good se joue à des énergies normales qui concernent peu l'émission électronique par effet de champ, et sur des différences d'amplitudes faibles (une dizaine de pourcents tout au plus) en comparaison aux sources d'incertitudes reliées aux autres simplifications de notre modèle.

## Références de l'annexe D

- [1] Edwin C. KEMBLE. « A Contribution to the Theory of the B. W. K. Method ». In : *Physical Review* 48.6 (sept. 1935), p. 549-561. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.48.549](https://doi.org/10.1103/PhysRev.48.549) (cf. p. 182, 185).
- [2] S. C. MILLER et R. H. GOOD. « A WKB-Type Approximation to the Schrödinger Equation ». In : *Physical Review* 91.1 (juill. 1953), p. 174-179. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.91.174](https://doi.org/10.1103/PhysRev.91.174) (cf. p. 182).
- [3] Richard G FORBES. « Use of a Spreadsheet for Fowler–Nordheim Equation Calculations ». In : (1999), p. 9 (cf. p. 184).
- [4] L. M MILNE-THOMSON. « Elliptic Integrals ». In : M ABRAMOWITZ et I. A. STEGUN. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 1972. Chap. 17 (cf. p. 184).
- [5] William H. PRESS et al. *Numerical Recipes in Fortran 77*. 2nd ed. Cambridge University Press, 1996 (cf. p. 184).

- [6] E. L. MURPHY et R. H. GOOD. « Thermionic Emission, Field Emission, and the Transition Region ». In : *Physical Review* 102.6 (juin 1956), p. 1464-1473. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.102.1464](https://doi.org/10.1103/PhysRev.102.1464) (cf. p. 185).
- [7] Ph TESTÉ et J-P CHABRERIE. « Some Improvements Concerning the Modelling of the Cathodic Zone of an Electric Arc (Ion Incidence on Electron Emission and the 'cooling Effect') ». In : *Journal of Physics D: Applied Physics* 29.3 (mars 1996), p. 697-705. ISSN : 0022-3727, 1361-6463. DOI : [10.1088/0022-3727/29/3/031](https://doi.org/10.1088/0022-3727/29/3/031) (cf. p. 185, 186).



## Annexe E

# Comparaison de la densité de courant avec les formules analytiques usuelles et représentation de Fowler-Nordheim

Cette annexe fait suite à l'établissement de la densité de courant selon l'équation 2.30 au chapitre 2. Elle propose une comparaison du calcul numérique de l'équation 2.30 utilisé dans notre modèle avec les résultats des formules analytiques généralement utilisées dans la littérature. Une seconde partie teste les performances de ces différentes formules pour déterminer le renforcement de champ au sommet d'un émetteur à partir de la représentation de Fowler-Nordheim de sa caractéristique courant-tension. Enfin, nous montrons comment l'autoéchauffement biaise cette opération et comparons les prédictions de notre modèle avec la seule extension analytique de la densité de courant prenant en compte la température.

### Comparaison aux équations analytiques de la pure émission de champ

Maintenant que nous avons donné le développement analytique sous-jacent au calcul numérique de la densité de courant dans notre modèle, comparons son résultat aux différentes équations analytiques de Fowler-Nordheim. Un certain nombre de variantes de cette équation sont en effet utilisées aujourd'hui (avec différents niveaux de précision) et il convient dans un premier temps de les détailler.

Pour simplifier, commençons par poser les constantes suivantes :

$$\begin{aligned} P(e_F) &:= 4 \frac{\sqrt{e_F \varphi}}{e_F + \varphi} \sim 1 \\ C_1 &:= \frac{e^3}{16\pi^2 \hbar} = 2.46 \times 10^{-25} \text{ [SI]} \\ C_2 &:= \frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar e} = 1.07 \times 10^{38} \text{ [SI]} \\ C_3 &:= \frac{4\pi\epsilon_0}{e^3} = 2.71 \times 10^{46} \text{ [SI]} \\ v &:= \frac{C_2}{6C_3\sqrt{\varphi}} = \sqrt{\frac{2m}{\varphi}} \frac{e^2}{18\pi\hbar\epsilon_0} = \frac{6.54 \times 10^{-10}}{\sqrt{\varphi}} \text{ [SI]} \end{aligned} \tag{E.1}$$

Avec ce formalisme, l'équation originale de Fowler-Nordheim sur la densité de courant  $j$  émise s'écrit [1] :

$$j(F) = P(e_F) \frac{C_1 F^2}{\varphi} \exp\left(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F}\right) \tag{E.2}$$

Le premier terme de cette équation,  $P(e_F)$ , fait intervenir l'énergie de Fermi  $e_F$  en plus du travail de sortie (ou de manière équivalente, l'énergie du bas de bande de conduction  $\epsilon_C$ ). Le calcul de la densité de courant requiert alors la connaissance d'un paramètre matériau supplémentaire, rarement mesuré expérimentalement. Pour les métaux, les valeurs typiques de  $e_F$  et  $\varphi$  donnent  $P(e_F)$  de l'ordre de l'unité. Par exemple, pour  $e_F = 7 \text{ eV}$ , et  $\varphi = 4.5 \text{ eV}$  on a  $P(e_F) = 1.95$ .

Pour s'affranchir de cette contrainte,  $P(e_F)$  est généralement pris égal à 1 dans les formules analytiques, au prix d'une perte de précision négligeable devant l'incertitude imposée par les autres hypothèses. On obtient alors la forme de la densité de courant suivante :

$$J_{FN}(F) = \frac{C_1 F^2}{\varphi} \exp\left(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F}\right) \quad (\text{E.3})$$

Bien que cette équation suppose une température nulle, elle reste valable à température ambiante (l'effet sur l'émission de l'agitation thermique à  $300 \text{ K}$  est négligeable).

Rappelons par ailleurs que cette équation suppose aussi une barrière triangulaire à l'interface métal vide. La prise en compte de la charge image implique l'utilisation des intégrales elliptiques (Eq. D.26 et D.27) et correspond à l'équation de Murphy et Good [2] (initialement développé par Nordheim [3]) :

$$J_{MG}(F) = \frac{C_1 F^2}{\varphi t^2(y_*)} \exp\left(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F} v(y_*)\right) \quad (\text{E.4})$$

Avec  $v$  la fonction de l'équation D.25 et  $t$  définie à partir de sa dérivée :

$$t(y) = v(y) - \frac{2}{3} y \frac{dv}{dy} \quad (\text{E.5})$$

Ces deux fonctions  $t$  et  $v$  sont parfois appelées *fonctions elliptiques*, car pouvant s'exprimer en fonction des intégrales elliptiques (Eq. D.28). Par ailleurs, la variable  $y_*$  est définie en prenant  $|\epsilon_n| = \varphi$  dans l'expression de  $y$  à l'équation D.12. Elle correspond ainsi au rapport entre l'abaissement Schottky  $\Delta\varphi$  et le travail de sortie  $\varphi$  :

$$y_* = \frac{\Delta\varphi}{\varphi} = \frac{|\mathcal{E}_{\max}|}{\varphi} = \frac{1}{\varphi} \sqrt{\frac{e^3 F}{4\pi\epsilon_0}} = \frac{1}{\varphi} \sqrt{\frac{F}{C_3}} \quad (\text{E.6})$$

Pour aller plus loin dans le développement de la densité de courant à partir de la formule de Murphy et Good, il est nécessaire d'approximer les fonctions elliptiques, ces dernières n'ayant pas d'expression analytique.

A partir d'une comparaison avec les valeurs exactes tabulées par Burgess *et al.* [4], Spindt *et al.* ont établi une paire d'approximations particulièrement simple [5] (*in ref.* Sec. III-A, Eq. 3) :

$$\begin{cases} v(y) \simeq v_0 - y^2 \\ t(y) \simeq t_0 \end{cases} \quad (\text{E.7})$$

avec  $v_0 = 0.95$  et  $t_0^2 = 1.1$ . Ces approximations sont souvent utilisées pour leur précision raisonnable au vu de leur grande simplicité. Elles permettent d'obtenir l'expression analytique suivante :

$$J_S(F) = \frac{C_1 F^2}{\varphi t_0^2} \exp\left(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F} v_0 + \frac{C_2}{C_3 \sqrt{\varphi}}\right) \quad (\text{E.8})$$

Plus récemment cependant, Forbes et Deane [6] ont trouvé une approximation bien plus précise, provenant d'un développement en série de la fonction  $v$  :

$$\begin{cases} v(y) \simeq 1 - \frac{y^2}{3}(3 - \ln(y)) \\ t(y) \simeq 1 - \frac{y^2}{9}(1 - \ln(y)) \end{cases} \quad (\text{E.9})$$

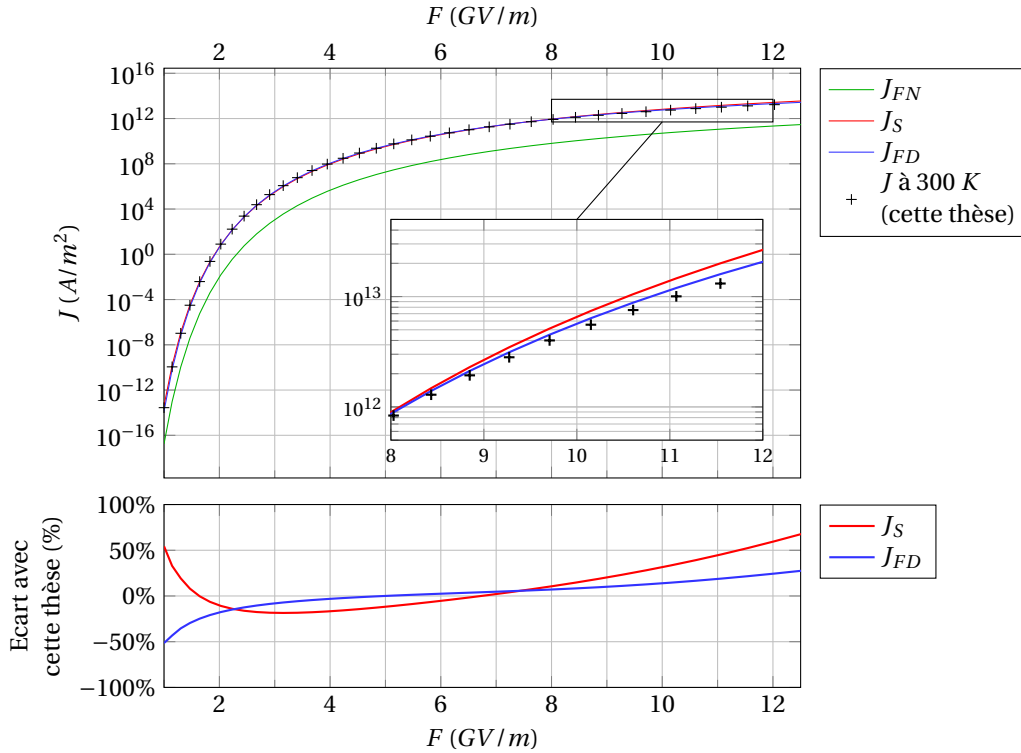


FIGURE E.1 – Comparaison des densités de courant obtenu avec le modèle numérique utilisé dans cette thèse et les formules analytiques rappelées dans le texte pour un travail de sortie  $\varphi = 4.5$  eV.

On utilise ici la forme du livre de Jensen [7] (*in ref.* Eq. 13.23 et 13.24), mais le lecteur pourra creuser l'établissement de ces approximations dans le papier de Forbes et Deane [6]. Ces approximations mènent à la forme suivante de la densité de courant :

$$J_{FD}(F) = \frac{C_1 F^{2-\nu}}{\varphi t^2(y_*)} (C_3 \varphi^2)^\nu \exp\left(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F}\right) \exp\left(\frac{C_2}{C_3 \sqrt{\varphi}}\right) \quad (\text{E.10})$$

où il faut noter que  $\nu$  dépend de  $\varphi$  (*cf.* Eq. E.1).

La figure E.1 compare la densité de courant des trois formules précédentes (équations encadrées) avec celle de notre modèle, le calcul numérique de l'expression 2.30, pour un travail de sortie  $\varphi = 4.5$  eV. Le zoom entre 8 et 12  $GV/m$  sur le panneau supérieur révèle comme attendu que l'approximation de Forbes et Deane (courbe bleue) se rapproche le plus de la solution numérique. De plus, on peut voir sur le panneau inférieur que l'écart avec notre modèle est globalement moindre pour  $J_{FD}$  sur toute la gamme d'intérêt, de 2 à 12  $GV/m$ , compris entre  $\pm 50\%$ . À l'inverse, en comparant  $J_{FN}$  (courbe verte) avec les autres formules, on voit que l'hypothèse d'une barrière triangulaire est responsable d'un écart d'environ 2 ordres de grandeur sur toute la gamme d'émission par rapport aux expressions prenant en compte la charge image.

Cette première comparaison pourrait justifier à elle seule l'avantage d'un calcul numérique par rapport à l'utilisation d'une équation analytique. Mais c'est en réalité la prise en compte de la température qui est déterminante dans notre cas.

## Résolution électrostatique et dépouillement de Fowler-Nordheim

Ceci étant dit, du fait de sa plus grande simplicité, la formule de  $J_{FN}$  reste très utilisée par les expérimentateurs<sup>1</sup> pour vérifier l'adéquation de leurs caractéristiques courant-tension (courbes I-V)

1. voir par exemple l'article de Groning *et al.*[8] (Eq. 1)



avec l'émission de champ. En particulier, en parallèle d'une mesure du travail de sortie, il est possible d'extraire des courbes I-V le facteur de renforcement de champ des sites émissifs. Ici, ce n'est pas la valeur absolue du courant qui est important mais son comportement avec le champ. Le principe consiste à expliciter le renforcement de champ local via  $F = \beta E$  et à réécrire l'équation dans les coordonnées  $\ln(J/E^2)$  vs  $1/E$ . On a alors :

$$\begin{aligned}\ln\left(\frac{J_{FN}}{E^2}\right) &= -C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{\beta} \cdot \frac{1}{E} + \ln\left(\frac{e^3 \beta^2}{16\pi^2 \hbar \varphi}\right) \\ &= A_{FN} \cdot \frac{1}{E} + B_{FN} \\ \Rightarrow \beta_{FN} &= -\frac{C_2}{A_{FN}} \varphi^{3/2}\end{aligned}\tag{E.11}$$

On obtient une équation très similaire avec l'approximation de Spindt, à un facteur  $\nu_0$  près dans la détermination finale de  $\beta$  :

$$\begin{aligned}\ln\left(\frac{J_S}{E^2}\right) &= -C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{\beta} \nu_0 \cdot \frac{1}{E} + \ln\left(\frac{C_1 \beta^2}{\varphi t_0^2}\right) + \frac{C_2}{C_3 \sqrt{\varphi}} \\ &= A_S \cdot \frac{1}{E} + B_S \\ \Rightarrow \beta_S &= -\frac{C_2}{A_S} \varphi^{3/2} \nu_0\end{aligned}\tag{E.12}$$

Avec l'approximation de Forbes et Deane, l'expression de  $t(y)$  rend la dépendance de la densité de courant avec le champ bien plus compliqué. Pour conserver la simplicité du processus, mais bénéficier de la précision accrue de cette approximation, Jensen recommande d'utiliser uniquement la forme de  $\nu(y)$ , et de se contenter de  $t(y) = t_0$ . On obtient ainsi :

$$\begin{aligned}\ln\left(\frac{J_{FD}}{E^{2-\nu}}\right) &= -C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{\beta} \cdot \frac{1}{E} + \ln\left(\frac{C_1 \beta^{2-\nu}}{\varphi t_0^2}\right) + \nu \ln(C_3 \varphi^2) + \frac{C_2}{C_3 \sqrt{\varphi}} \\ &= A_J \times \frac{1}{E} + B_J \\ \Rightarrow \beta_J &= -\frac{C_2}{A_J} \varphi^{3/2}\end{aligned}\tag{E.13}$$

avec l'indice  $J$  pour Jensen.

On peut alors utiliser ces trois formules pour estimer le renforcement de champ d'un émetteur à partir des données  $J$  vs  $E$  calculées par notre modèle numérique. En prenant par exemple la densité de courant émise au sommet d'une pointe héli ellipsoïdale de facteur d'aspect  $f = 5$ , on obtient les régressions linéaires présentées sur la figure E.2.

Alors que le renforcement de champ exact au sommet de la pointe vaut 17.9 (voir Eq. 2.53), la régression linéaire des données  $J$  vs  $E$  donne respectivement un renforcement de champ de 19.6 avec  $J_{FN}$  (Eq. E.11), 18.7 avec  $J_S$  (Eq. E.12) et 18.2 avec  $J_{FD}$  (Eq. E.13). Il apparaît une nouvelle fois que l'expression de Forbes et Deane est la plus proche de notre modèle numérique.

Le tableau E.1 récapitule les résultats pour d'autres valeurs de facteur d'aspect. On voit que l'estimation du renforcement de champ avec l'expression de Jensen se rapproche d'une précision au pourcent près tandis que l'expression de Fowler-Nordheim s'écarte de presque une dizaine de pourcents.

Remarquons enfin que lorsqu'on augmente le champ appliqué jusqu'à entrer en régime d'émission de champ thermoassisté, l'autoéchauffement de l'émetteur biaise la régression linéaire. Cela se traduit par un fléchissement vers le haut de la caractéristique I-V, comme le mettent en évidence les marqueurs rouges sur la figure E.2). Ce fléchissement traduit le changement de régime (depuis un régime d'émission de champ pur à un régime d'émission de champ thermoassisté). Il est alors important de ne pas prendre en compte les données correspondantes dans la détermination du renforcement de champ.

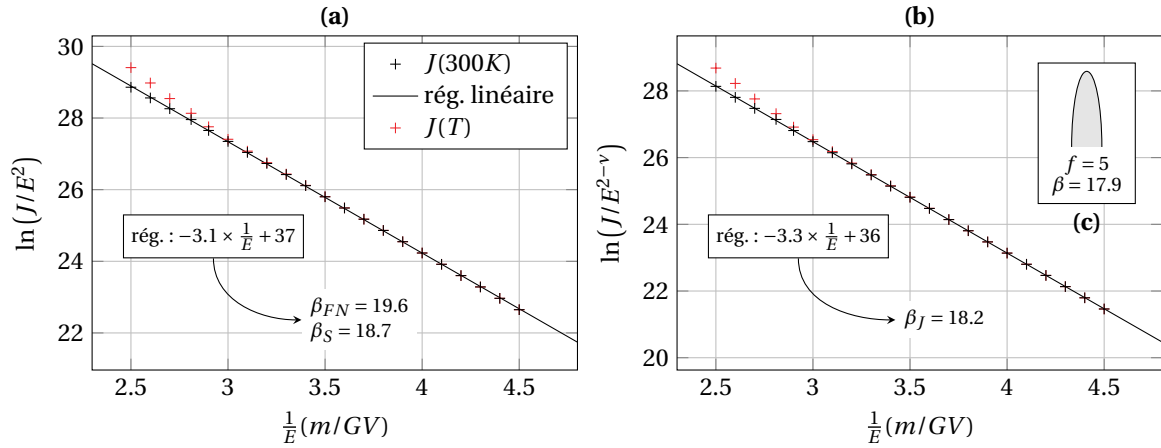


FIGURE E.2 – Représentation graphique dite de Fowler-Nordheim de la densité de courant à 300 K (marqueurs noirs) d'un émetteur hemi-ellipsoïdal avec  $H = 10 \mu m$  et  $f = 5$ . Le renforcement de champ  $\beta$  au sommet de l'émetteur est évalué à partir d'une régression linéaire (a) : suivant les équations E.11 et E.12. (b) : suivant l'équation E.13. (c) : Schéma de l'émetteur considéré. Les marqueurs en rouge montrent comment la température fait dévier la densité de courant de la relation linéaire.

$f$	$\beta$ analytique	$\beta$ (FN)	$\beta$ (Spindt)	$\beta$ (Jensen)
1	3.00	3.22 (+7.19%)	3.07 (+2.47%)	3.04 (+1.30%)
2	5.76	6.18 (+7.31%)	5.91 (+2.59%)	5.84 (+1.37%)
5	17.9	19.6 (+9.30%)	18.7 (+4.49%)	18.2 (+1.78%)
10	49.3	53.4 (+8.30%)	51.0 (+3.53%)	50.1 (+1.58%)

TABLE E.1 – Valeurs de renforcement de champ trouvées par dépouillement de Fowler-Nordheim sur la densité de courant émise, pour les différentes approximations analytiques utilisées.

## Extension analytique avec la température

À mesure que la température monte avec l'autoéchauffement, le nombre d'électrons incidents avec une forte énergie normale augmente. La transmission par effet tunnel étant plus grande à ces niveaux plus énergétiques, la densité de courant augmente en conséquence, et ce sans modification du champ électrique.

Dans leur papier de 1956, Murphy et Good [2] ont cherché à étendre les formules analytiques de Fowler et Nordheim (pure émission de champ) et de Richardson (pure émission thermoionique) pour capter la transition entre les deux régimes d'émission. Ils ont alors défini trois régions dans l'espace champ-température au sein desquelles l'utilisation de développements limités permet de calculer l'intégral du produit  $SF(\epsilon_n, T) \times D(\epsilon_n, F)$ . Une expression analytique de la densité de courant est ainsi obtenue dans chacune des régions. La figure E.3 présente ces régions pour un travail de sortie  $\varphi = 4.5 \text{ eV}$ . Il est important de noter qu'il subsiste une grande surface de l'espace champ-température non couverte par ces expressions analytiques.

L'expression qui nous intéresse ici est celle de l'émission de champ assisté par la température. Elle consiste essentiellement en l'introduction d'un facteur correctif en sinus cardinal de la température par rapport à l'équation E.4 :

$$J_{MG}(T) = \frac{\pi k_B T / d}{\sin(\pi k_B T / d)} \times \frac{C_1 F^2}{\varphi t^2(y_*)} \exp\left(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F} \nu(y_*)\right) \quad (\text{E.14})$$

où l'on a introduit

$$\frac{1}{d} = \frac{3}{2} C_2 \frac{t(y) \sqrt{\varphi}}{F} \quad (\text{E.15})$$

Cette expression couvre une bonne partie de notre zone d'intérêt, jusqu'à  $\gtrsim 10 \text{ GV/m}$  et  $2500 \text{ K}$  mais perd sa validité en s'approchant à la fois des forts champs électriques et des hautes températures qui s'avèreront nécessaires pour étudier l'autoéchauffement d'émetteurs en métaux réfractaires comme le tungstène, le tantale ou le molybdène.

On peut quantifier plus précisément les limites de l'approximation de Murphy et Good en s'intéressant à l'écart en densité de courant entre notre calcul numérique de  $J(F, T)$  et la valeur analytique de  $J_{MG}(F, T)$ . La figure E.4 montre alors bien que plus la température augmente, moins la formule est précise (plus l'écart se creuse avec le calcul numérique). Comme le laissait entendre la forme en cloche de la région d'émission de champ sur la figure E.3, l'écart est d'autant plus marqué à faible et fort champ. Si l'erreur à faible champ pourrait être compensée par l'utilisation des formules analytiques des deux autres régions, l'erreur à fort champ est davantage problématique pour étudier l'autoéchauffement.

En effet, tout l'intérêt de modéliser l'autoéchauffement des émetteurs est de pouvoir estimer le champ (ou la densité de courant) critique au-delà duquel l'émetteur dépasse sa température de fusion (*cf.* flèches rouges sur la figure E.3). Ce phénomène requérant de forts champs électriques ( $> 6 \text{ GV/m}$ ) et menant à de hautes températures ( $2000 \leftrightarrow 4000 \text{ K}$ ), il ne sera pas correctement décrit par l'équation E.14, en particulier pour les métaux réfractaires pour qui la température de fusion dépasse largement les  $2000 \text{ K}$ .

En s'affranchissant des solutions analytiques et de leurs contraintes, notre calcul numérique peut déterminer la densité de courant à n'importe quelle valeur de champ et de température. On pourra ainsi capter le phénomène d'autoéchauffement dans son intégralité et étudier la transition de l'émission depuis un régime de pure émission de champ vers un régime d'émission de champ thermoassisté, jusqu'à la destruction thermique de l'émetteur.

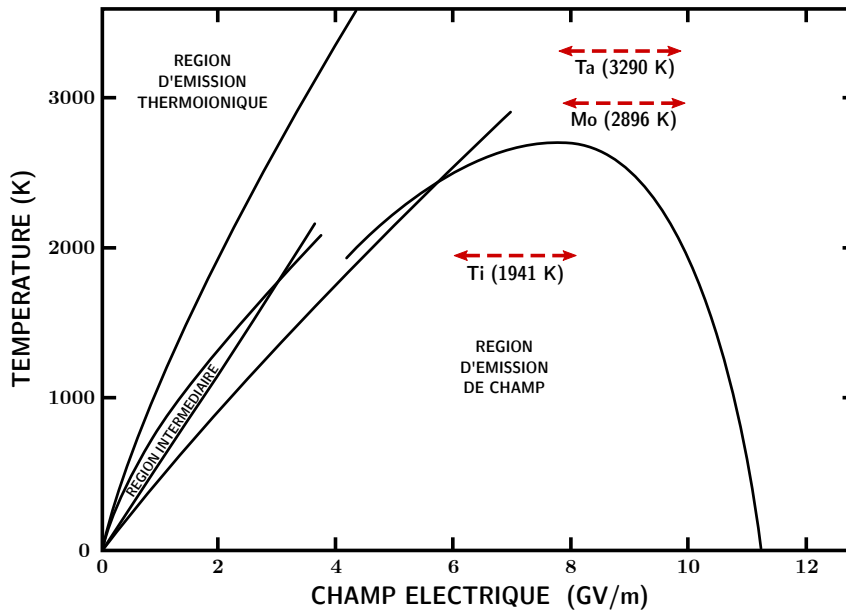


FIGURE E.3 – Les trois régions d'émission définies par Murphy et Good pour un travail de sortie  $\varphi = 4.5 \text{ eV}$ . Reproduit à partir de [2] (Fig 6.). Les flèches rouges ont été ajoutées. Elles délimitent grossièrement – pour des émetteurs hémipellipsoïdaux avec  $H = 10 \mu\text{m}$  et  $f$  de 1 à 10 – les gammes de champ atteint au sommet des émetteurs menant à la température de fusion (spécifiée entre parenthèses) pour le titane (Ti), le molybdène (Mo) et le tantale (Ta).

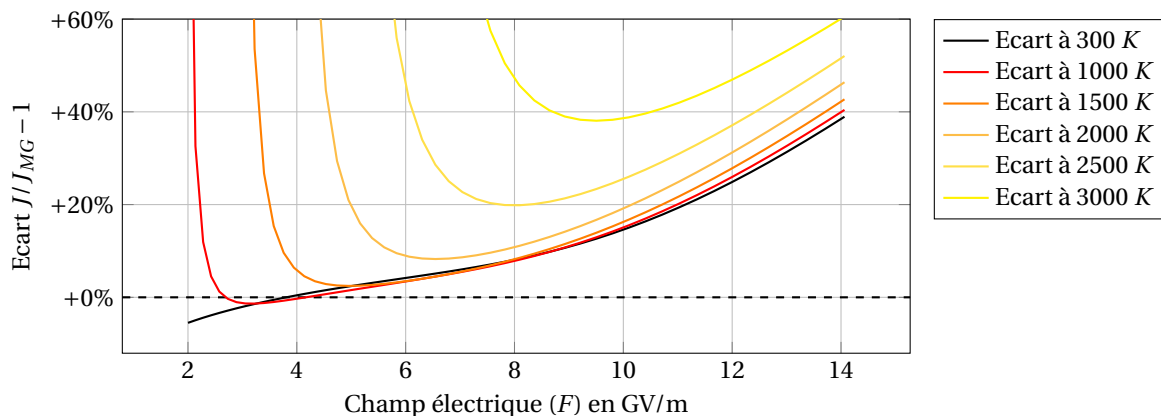


FIGURE E.4 – Écart en densité de courant entre notre calcul numérique et la formule analytique de Murphy et Good corrigée en température (Eq. E.14) et utilisant l'approximation de Forbes et Deane pour les fonctions elliptiques (Eq. E.9). Le travail de sortie vaut  $4.5 \text{ eV}$ .

## Références de l'annexe E

- [1] S. FLÜGGE. *Electron-Emission Gas Discharges I / Elektronen-Emission Gasentladungen I. Elektrisches Und Magnetisches Verhalten Der Materie / Electric and Magnetic Behavior of Matter*. Berlin Heidelberg : Springer-Verlag, 1956. ISBN : 978-3-642-45846-0. DOI : [10.1007/978-3-642-45844-6](https://doi.org/10.1007/978-3-642-45844-6) (cf. p. 189).
- [2] E. L. MURPHY et R. H. GOOD. « Thermionic Emission, Field Emission, and the Transition Region ». In : *Physical Review* 102.6 (juin 1956), p. 1464-1473. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.102.1464](https://doi.org/10.1103/PhysRev.102.1464) (cf. p. 190, 194, 195).
- [3] L. W. NORDHEIM. « The Effect of the Image Force on the Emission and Reflexion of Electrons by Metals ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 121.788 (1928), p. 626-639. ISSN : 0950-1207 (cf. p. 190).
- [4] R. E. BURGESS, H. KROEMER et J. M. HOUSTON. « Corrected Values of Fowler-Nordheim Field Emission Functions  $\psi(y)$  and  $\phi(y)$  ». In : *Physical Review* 90.4 (mai 1953), p. 515-515. DOI : [10.1103/PhysRev.90.515](https://doi.org/10.1103/PhysRev.90.515) (cf. p. 190).
- [5] C. A. SPINDT et al. « Physical properties of thin-film field emission cathodes with molybdenum cones ». In : *Journal of Applied Physics* 47.12 (déc. 1976), p. 5248-5263. ISSN : 0021-8979. DOI : [10.1063/1.322600](https://doi.org/10.1063/1.322600). URL : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.322600> (visité le 22/08/2018) (cf. p. 190).
- [6] Jonathan H. B. DEANE et Richard G. FORBES. « The Formal Derivation of an Exact Series Expansion for the Principal Schottky Nordheim Barrier Function  $v$ , Using the Gauss Hypergeometric Differential Equation ». In : *Journal of Physics A Mathematical General* 41 (oct. 2008), p. 395301. ISSN : 0305-4470. DOI : [10.1088/1751-8113/41/39/395301](https://doi.org/10.1088/1751-8113/41/39/395301) (cf. p. 190, 191).
- [7] Kevin JENSEN. *Introduction to the Physics of Electron Emission*. Chichester, UK : John Wiley & Sons, Ltd, nov. 2017. ISBN : 978-1-119-05179-4 978-1-119-05189-3. DOI : [10.1002/9781119051794](https://doi.org/10.1002/9781119051794) (cf. p. 191).
- [8] O. GRÖNING et al. « Field Emission Properties of Carbon Nanotubes ». en. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 18.2 (2000), p. 665. ISSN : 0734211X. DOI : [10.1116/1.591258](https://doi.org/10.1116/1.591258) (cf. p. 191).

## Annexe F

# Détail du calcul établissant la forme de distribution en énergie totale des électrons émis

*Cette annexe détaille le calcul de la distribution en énergie totale des électrons émis, introduite par l'équation 2.32 au chapitre 2.*

Pour le calcul de la distribution en énergie totale des électrons émis, il faut prendre en compte la répartition de l'énergie cinétique entre la composante normale  $k_z$  et les composantes parallèles  $k_x$  et  $k_y$ . À une impulsion normale  $k_z$  donnée (à  $dk_z$  près), les états contribuant au courant avec une énergie totale  $\epsilon = \epsilon_C + (\hbar k)^2/2m$  sont ceux tels que  $k_x^2 + k_y^2 = k^2 - k_z^2 = k_p^2$ . Ainsi, dans l'espace des impulsions  $\{k_x, k_y, k_z\}$ , ils correspondent aux états situés sur la couronne de rayon  $k_p$  perpendiculaire à l'axe  $z$  mis en évidence sur la figure E1. On peut déterminer le nombre de ces états de la manière suivante :

$$v(k_p)dk_p = \frac{\text{volume de la couronne}}{\text{volume d'un état}} \times 2 = \frac{2\pi k_p dk_p dk_z}{8\pi^3/V} \times 2 \quad (\text{E1})$$

où le facteur 2 correspond à la prise en compte du spin 1/2 des électrons. La densité volumique d'électrons occupant ces états est donc :

$$f(k_p)dk_p = \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) \frac{v(k_p)}{V} dk_p = \frac{4\pi k_p dk_p dk_z}{8\pi^3} \times \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) \quad (\text{E2})$$

Ces électrons arrivent sur l'interface métal-vide avec une vitesse normale  $v_z = \hbar k_z/m$  et la traversent avec une probabilité égale au coefficient de transmission. Ainsi, pour obtenir la contribution à la densité de courant  $dJ(\epsilon)$  de tous les électrons ayant une énergie totale  $\epsilon$  à  $d\epsilon$  près, il faut intégrer sur toutes les vitesses normales accessibles orientées vers l'interface :

$$\begin{aligned} dJ(\epsilon) &= -e \int_{k_z=0}^k \frac{\hbar k_z}{m} \times D(k_z, F) \times f(k_p) dk_p \\ &= -e \int_0^k \left( \frac{\hbar}{m} \times D(k_z, F) \times \frac{4\pi k_p dk_p}{8\pi^3} \times \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) \right) k_z dk_z \end{aligned} \quad (\text{E3})$$

or  $k_p dk_p = k dk = m d\epsilon / \hbar^2$  et  $k_z dk_z = m d\epsilon_n / \hbar^2$  d'où :

$$dJ(\epsilon) = -e \int_{\epsilon_C}^{\epsilon} \left( \frac{4\pi m d\epsilon}{8\pi^3 \hbar^3} \times \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) \times D(\epsilon_n, F) \right) d\epsilon_n \quad (\text{E4})$$

et finalement

$$\frac{dJ(\epsilon)}{d\epsilon} = -\frac{4\pi m e}{h^3} \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) \int_{\epsilon_C}^{\epsilon} D(\epsilon_n, F) d\epsilon_n \quad (\text{E5})$$

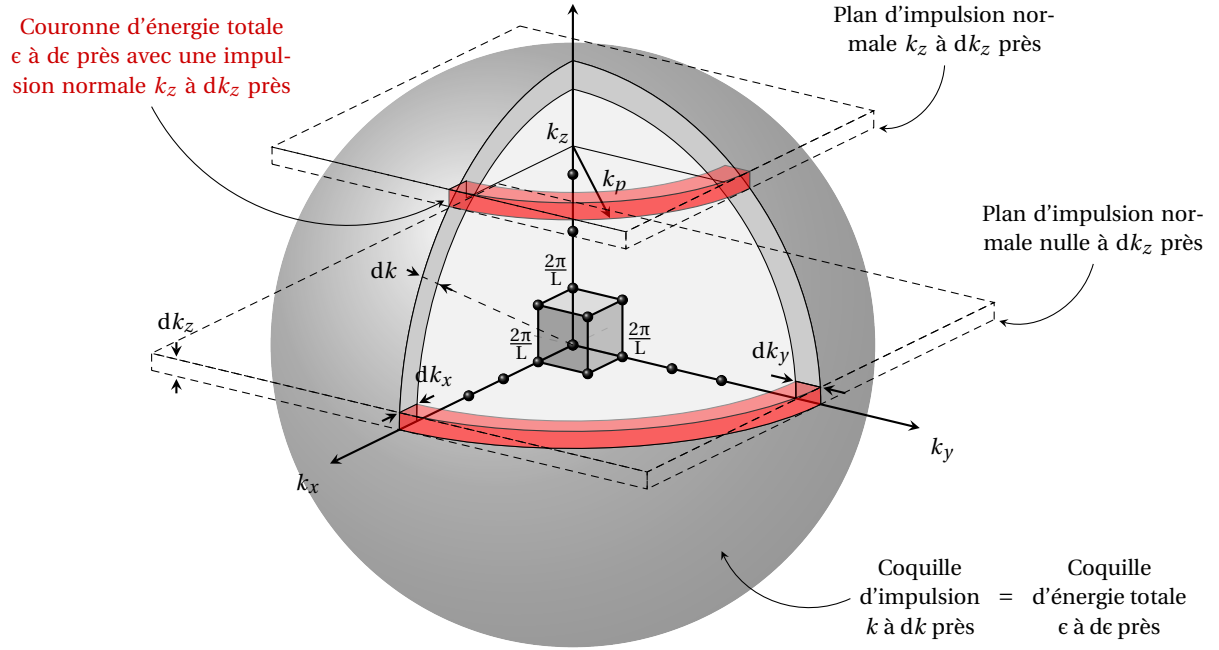


FIGURE F.1 – Représentation dans l'espace des impulsions des états ayant une énergie totale  $\epsilon$  quelconque *et* une énergie normale  $\epsilon_n$  donnée. Ces états sont situés à l'intersection (en rouge) entre la coquille de rayon  $k$  (où  $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ ) et le plan  $\{k_x, k_y\}$  passant par  $k_z$  où  $\epsilon_n = \epsilon_c + (\hbar k_z)^2$ .

où  $dJ(\epsilon)/d\epsilon$  est la densité de courant émise par unité d'énergie totale, en [*courant* · *surface*<sup>-1</sup> · *énergie*<sup>-1</sup>]. La distribution en énergie totale des électrons émis (TED pour *Total Energy Distribution*) est alors :

$$TED(\epsilon) = \frac{1}{J} \frac{dJ(\epsilon)}{d\epsilon}$$

$$\Rightarrow TED(\epsilon, F, T, \varphi) = \left| \frac{e}{J(F, T, \varphi)} \right| \frac{4\pi m}{h^3} \bar{N}(\epsilon, T, \varphi) \int_{\epsilon_c}^{\epsilon} D(\epsilon_n, F) d\epsilon_n \quad (E6)$$

de sorte que  $TED(\epsilon)d\epsilon = dJ(\epsilon)/J$  donne bien la proportion de densité de courant émise entre  $\epsilon$  et  $\epsilon + d\epsilon$ .

### Remarque sur la normalisation

Montrons que la distribution en énergie totale est bien normalisée à 1. On veut pour cela calculer :

$$\int_{\epsilon=\epsilon_c}^{+\infty} TED(\epsilon, F, T) d\epsilon = \left| \frac{e}{J(F, T, \varphi)} \right| \int_{\epsilon=\epsilon_c}^{+\infty} \int_{\epsilon_n=\epsilon_c}^{\epsilon} \frac{4\pi m}{h^3} \bar{N}(\epsilon, T) \cdot D(\epsilon_n, F) d\epsilon_n d\epsilon \quad (E7)$$

En décomposant habilement les intégrales, on remarque que :

$$\begin{aligned}
 \int_{\epsilon=\epsilon_C}^{+\infty} \int_{\epsilon_n=\epsilon_C}^{\epsilon} (\bar{N} \cdot D) d\epsilon_n d\epsilon &= \int_{\epsilon=\epsilon_C}^{\overbrace{\epsilon_n}^{\text{nul car } \epsilon \geq \epsilon_n}}^{\epsilon} \int_{\epsilon_n=\epsilon_C}^{\epsilon} (\bar{N} \cdot D) d\epsilon_n d\epsilon + \int_{\epsilon=\epsilon_n}^{+\infty} \int_{\epsilon_n=\epsilon_C}^{\epsilon} (\bar{N} \cdot D) d\epsilon_n d\epsilon \\
 &= \int_{\epsilon=\epsilon_n}^{+\infty} \int_{\epsilon_n=\epsilon_C}^{+\infty} (\bar{N} \cdot D) d\epsilon_n d\epsilon - \int_{\epsilon=\epsilon_n}^{+\infty} \underbrace{\int_{\epsilon_n=\epsilon}^{+\infty} (\bar{N} \cdot D) d\epsilon_n d\epsilon}_{\text{nul car } \epsilon_n \leq \epsilon} \\
 &= \int_{\epsilon_n=\epsilon_C}^{+\infty} \int_{\epsilon=\epsilon_n}^{+\infty} (\bar{N} \cdot D) d\epsilon d\epsilon_n
 \end{aligned} \tag{E8}$$

Ainsi, on peut réécrire l'équation E7 en faisant apparaître la forme du courant de l'équation 2.15 :

$$\begin{aligned}
 \int_{\epsilon=\epsilon_C}^{+\infty} TED(\epsilon, F, T) d\epsilon &= \frac{-e}{J(F, T)} \int_{\epsilon_n=\epsilon_C}^{+\infty} \left( \int_{\epsilon=\epsilon_n}^{+\infty} \frac{4\pi m}{h^3} \bar{N}(\epsilon, T) d\epsilon \right) D(\epsilon_n, F) d\epsilon_n \\
 &= \frac{[\text{Eq. 2.15}]}{J(F, T)} \\
 &= 1
 \end{aligned} \tag{E9}$$





## Annexe G

# Influence du maillage en 3D sur la précision des simulations

*Cette annexe décrit la méthode utilisée pour évaluer l'imprécision sur le champ électrique lié au maillage en géométrie 3D, dont le raffinement est limité pour conserver un temps de calcul raisonnable (cf. chapitre 2, section 2.3.3). L'erreur sur le courant qui en découle est aussi estimée. Il ne s'agit en revanche pas d'une étude exhaustive, mais simplement d'une évaluation grossière qui offre une idée de l'ordre de grandeur associé à cette source d'incertitude.*

La seule solution analytique exacte dont nous disposons concernant le champ électrique local  $F = \beta E$  est le renforcement de champ au sommet d'une pointe hémisphérique de facteur d'aspect  $f$  [1] :

$$\beta(f) = \frac{(f^2 - 1)^{3/2}}{f \ln \left[ f + (f^2 - 1)^{1/2} \right] - (f^2 - 1)^{1/2}} \quad (\text{G.1})$$

On peut utiliser cette expression comme référence pour la valeur du champ en un point unique, mais cela n'est pas suffisant pour déterminer le courant émis par toute la pointe. L'idée est donc de se servir de cette expression exacte pour déterminer d'abord un maillage 2D axisymétrique de référence qui servira ensuite à évaluer l'imprécision en 3D.

### Définition du maillage 2D axisymétrique de référence

Pour définir le maillage de référence en géométrie 2D axisymétrique, nous avons testé trois maillages successifs de plus en plus raffinés. Leurs paramètres sont donnés dans le tableau G.2. Nous avons en-

2D axi	$h_{\max}$	$h_{\min}$	$h_{\text{grad}}$	$h_{\text{curve}}$	$N_{\text{elem}}$	$\langle  \text{Erreur}  \rangle$ (%)
maillage 1			1.3	0.3	$2 \times 10^3$	1.409
maillage 2	$H$	$10^{-4}H$	1.1	0.1	$6 \times 10^3$	0.256
maillage 3			1.03	0.01	$75 \times 10^3$	0.002

TABLE G.2 – Paramètres relatifs au maillage sous COMSOL pour les trois configurations 2D axisymétriques testées.  $h_{\max}$  et  $h_{\min}$  sont respectivement les tailles maximales et minimales des éléments.  $h_{\text{grad}}$  est le rapport maximal pouvant exister entre la taille de deux éléments voisins.  $h_{\text{curve}}$  impose en chaque point d'une frontière courbe le rapport entre la taille de l'élément et le rayon de courbure en ce point.  $N_{\text{elem}}$  renseigne le nombre d'éléments total dans le domaine de simulation.  $\langle |\text{Erreur}| \rangle$  est la moyenne sur les dix facteurs d'aspect testés de l'erreur définie par l'équation G.2.

suite évalué la précision avec laquelle ils s'approchent du résultat analytique de l'expression G.1 via :

$$|\text{Erreur}| = \frac{\beta_{2D}(f) - \beta(f)}{\beta(f)} \quad (\text{G.2})$$

La figure G.1 montre les performances des trois maillages pour dix facteurs d'aspect allant de 1 à 10 (la gamme la plus explorée dans cette thèse). La valeur moyenne de l'erreur sur ces dix facteurs d'aspect est consignée dans le tableau G.2. Le maillage 3 (surligné en gris) offre une erreur moyenne de 0.002% ce qui est amplement suffisant pour ne pas avoir de répercussion sur le courant au dixième de pourcent près. Nous choisissons donc ce maillage comme référence. La figure G.2 montre la répartition des éléments pour ce maillage autour du sommet de la pointe.

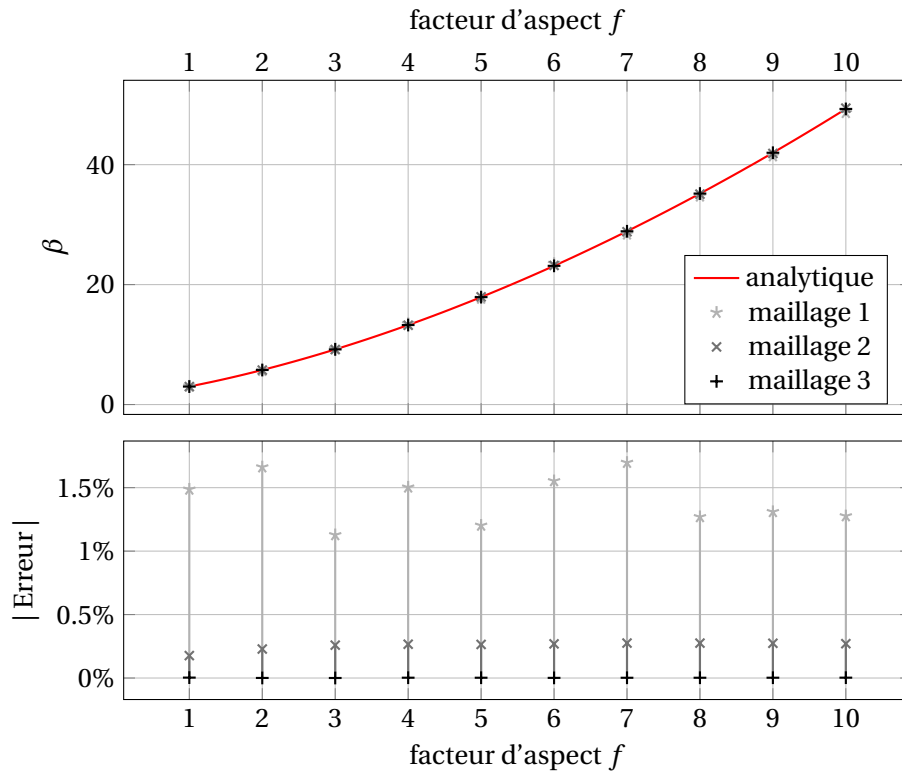


FIGURE G.1 – Adéquation avec la formule analytique G.1 du coefficient de renforcement de champ au sommet  $\beta$  calculé par COMSOL via la résolution de l'équation de Laplace pour trois maillages différents. Les paramètres associés à ces maillages sont donnés dans le tableau G.2. Le graphique inférieur donne l'écart relatif en valeur absolue entre la solution numérique (courbe rouge sur graphique supérieur) et le calcul analytique (marqueurs en nuance de gris sur le graphique supérieur).

### Évaluation de l'incertitude liée au maillage en 3D

Nous testons ensuite les performances de trois maillages 3D présentés sur la figure G.3 pour une pointe hémipellipsoïde de facteur d'aspect  $f = 10$ . Leurs paramètres sont donnés dans le tableau G.4. En résolvant successivement l'équation de Laplace pour ces trois maillages, on obtient trois distributions radiales de champ  $F_{3D}(r)$  (le long d'une valeur orthoradiale  $\theta$  constante, choisie arbitrairement). On évalue alors l'incertitude sur ces distributions par le biais de la quantité suivante :

$$\sigma_F(3D) = \left( \frac{\int_0^R \left[ \frac{F_{3D}(r) - F_{2D}(r)}{F_{2D}(r)} \right]^2 d\ell}{\int_0^R d\ell} \right)^{1/2} \quad (\text{G.3})$$

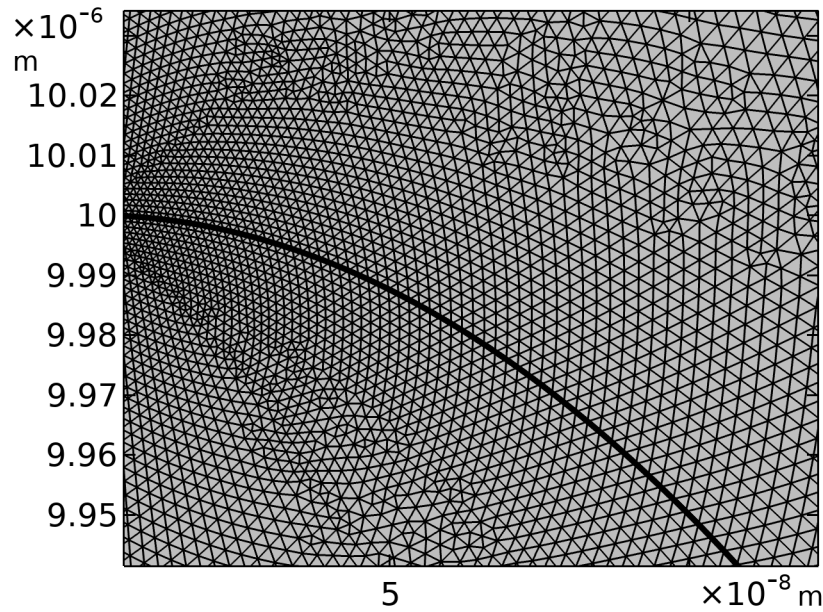


FIGURE G.2 – Répartition des éléments pour le maillage 3 sélectionné comme référence pour évaluer ensuite l'erreur liée au maillage en 3D.

3D	$h_{\max}$	$h_{\min}$	$h_{\text{grad}}$	$h_{\text{curve}}$	$N_{\text{elem}}$	$\sigma_F$ (%)	$\varepsilon_I^{\text{mesh}}$ (%)
maillage 1			1.3	0.3	$3.5 \times 10^5$	2.443	<b>-16.3</b>
maillage 2	$H$	$10^{-4}H$	1.3	0.15	$4.5 \times 10^5$	0.641	<b>-2.7</b>
maillage 3			1.2	0.07	$1.1 \times 10^6$	0.167	<b>-1.6</b>

TABLE G.4 – Paramètres relatifs au maillage sous COMSOL pour les trois configurations 3D testées.  $h_{\max}$  et  $h_{\min}$  sont respectivement les tailles maximales et minimales des éléments.  $h_{\text{grad}}$  est le rapport maximal pouvant exister entre la taille de deux éléments voisins.  $h_{\text{curve}}$  impose en chaque point d'une frontière courbe le rapport entre la taille de l'élément et le rayon de courbure en ce point.  $N_{\text{elem}}$  renseigne le nombre d'éléments total dans le domaine de simulation.  $\sigma_F$  indique l'incertitude sur le champ local  $F$  (Eq. G.3).  $\varepsilon_I^{\text{mesh}}$  donne l'erreur sur le courant lié au maillage en 3D par rapport à la référence 2D axisymétrique (Eq. G.4).

où  $F_{2D}(r)$  est la distribution radiale de champ en géométrie 2D axisymétrique obtenu avec le maillage de référence, et  $\ell(r)$  est l'abscisse curviligne. Cette erreur relative sur le champ est indépendante de la valeur du champ global  $E$ , mais ce n'est pas le cas du courant.

Pour un champ  $E = 0.16 \text{ GV/m}$  tel que le courant émis en 2D vaut  $I_{2D}^{\text{ref}} = 10 \text{ mA}$ , l'erreur sur le courant lié au maillage en 3D est déterminée par :

$$\varepsilon_I^{\text{mesh}} = \frac{I_{3D} - I_{2D}^{\text{ref}}}{I_{2D}^{\text{ref}}} \quad (\text{G.4})$$

Les valeurs de  $\sigma_F$  et  $\varepsilon_I^{\text{mesh}}$  sont récapitulées dans le tableau G.4.

Ce sont les paramètres du maillage 3 (surligné en gris dans le tableau G.4) que nous avons décidé de conserver pour nos simulations 3D avec des hémiiplipsoïdes. Avec ce maillage, l'incertitude sur le courant est de l'ordre du pourcent, ce qui reste tout à fait raisonnable au vu des autres hypothèses du modèle, mais qu'il faut tout de même garder à l'esprit. Raffiner davantage le maillage a été envisagé, mais le million d'éléments est déjà atteint avec ce maillage pour une seule pointe. Au-delà, le calcul devient rapidement trop lourd pour les cas à plusieurs points.

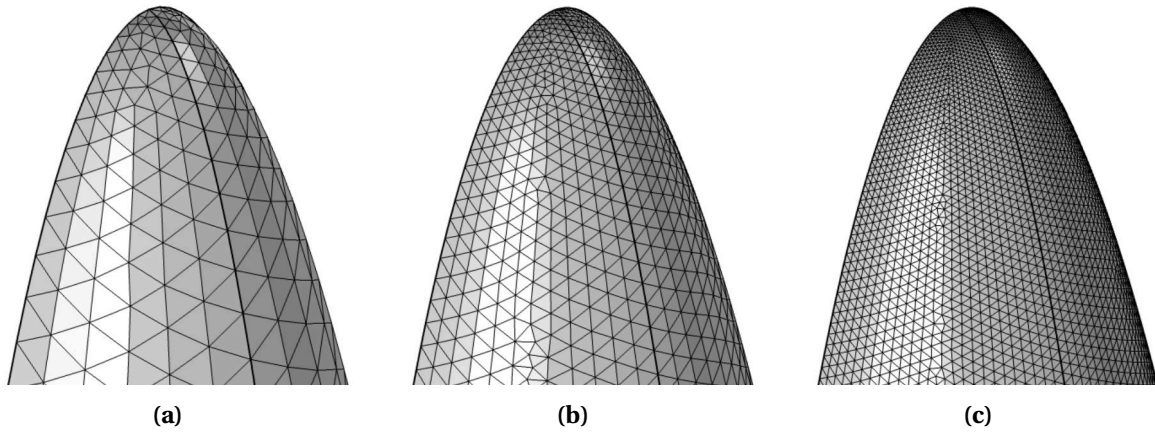


FIGURE G.3 – Raffinement du maillage au sommet de l'émetteur ( $f = 10$ ). **(a)** : Maillage 1. **(b)** : Maillage 2. **(c)** : Maillage 3. Seules sont visibles les mailles 2D (triangles) à la surface des frontières, définies par les points d'accroche des mailles 3D (tétraèdres).

## Références de l'annexe G

- [1] F. ROHRBACH. « Sur les mécanismes qui conduisent à la formation de l'étincelle électrique à très haute tension et sous ultra-vide par la mesure du temps de retard à la disruption ». Thèse de doct. Oct. 1971 (cf. p. 201).

## Annexe H

# Propriétés matériaux

Dans le cadre de notre modèle, la résolution de l'électrostatique nécessite essentiellement l'hypothèse de la nature conducteur du matériaux de la cathode. Pour la résolution de l'auto-échauffement en revanche, une difficulté supplémentaire réside dans le choix des propriétés matériaux. L'équation de la chaleur requiert la connaissance des trois propriétés suivantes : la masse volumique  $\mu$ , la chaleur spécifique  $c$ , la conductivité thermique  $\kappa$ , auxquelles il faut ajouter la conductivité électrique  $\sigma$ , aussi bien pour calculer l'effet joule que résoudre la conservation de la charge. Reprenant les références de la bibliothèque de matériaux intégrée de Comsol 5.4, nos simulations utilisent des valeurs dépendantes de la température, sur une gamme allant généralement de 300 K à la température de fusion (extrapolation constante en dehors de cette gamme). Pour simplifier la reproduction de nos résultats la table H.2 donne les références correspondantes. Par ailleurs, la figure H.1 montre la dépendance en température des conductivités thermique et électrique.

	<b>Titane</b>	<b>Tungstène</b>	<b>Tantale</b>	<b>Molybdène</b>	<b>Graphite</b>
Nom Comsol	Titanium	Tungsten	Tantalum	Molybdenum	Graph. TRA-1 <sup>1</sup>
Phase	solid	solid	solid	solid	–
Orientation	alpha	polycrystalline	–	polycrystalline	–
$\mu(T)$	[1]	[2]	[3]	[1]	[4]
$c(T)$	[5]	[6]	[5]	[7]	[4]
$\kappa(T)$	[8]	[9, 8] <sup>2</sup>	[8]	[8]	[10]
$\sigma(T)$	[11]	[12]	[12]	[12]	[10]
$\varphi$	4.3 eV[13]	4.5 eV[13, 14]	4.5 eV <sup>3</sup>	4.5 eV <sup>3</sup>	4.9 eV[15]

TABLE H.2 – Tableau des différentes références matériaux provenant de la bibliothèque Comsol 5.4

<sup>1</sup>Dans la version 5.4 de Comsol, seuls la masse volumique et la chaleur spécifique du graphite TRA-1 sont renseignés. Nous utilisons donc la référence [10] pour les conductivités électrique et thermique.

<sup>2</sup>La conductivité thermique du tungstène suit les valeurs plus récentes de Binkele [9] jusqu'à 1266 K. Au delà de 1266 K en revanche, les valeurs proviennent des résultats de Ho et al. [8] et ont été multiplié par 0.84 pour rétablir la continuité avec les données de Binkele.

<sup>3</sup>Le travail de sortie du tantale et du molybdène sont dans les fait différent de celui du tungstène. Cependant, ils ont été pris égaux dans le cadre de cette thèse afin de mieux pouvoir comparer leur résultat et d'isoler l'influence de leurs conductivités.

Le dernier paramètre matériaux d'importance est le travail de sortie  $\varphi$ , directement utilisé dans le code d'émission électronique dont dépend la densité de courant émise  $J(F, T, \varphi)$  et la densité de flux de chaleur Nottingham  $\Phi_N(F, T, \varphi)$ . Bien qu'en situation réelle le travail de sortie risque fort de varier en fonction de l'orientation cristalline le long de la surface de l'émetteur, notre modèle suppose une valeur constante. Pour le titane et le tungstène, nous l'avons donc pris égal à la valeur polycrystalline,

respectivement 4.3 eV et 4.5 eV. Pour le tantale et le molybdène, un travail de sortie identique à celui du tungstène a été choisi afin d'isoler l'influence de leur conductivité dans le chapitre 3. Enfin, le travail de sortie des nanostructures de carbone a été fixé à 4.9 eV, valeur moyenne entre la mesure pour différentes configurations de graphite. Les références sont à nouveau renseignées dans la table H.2.

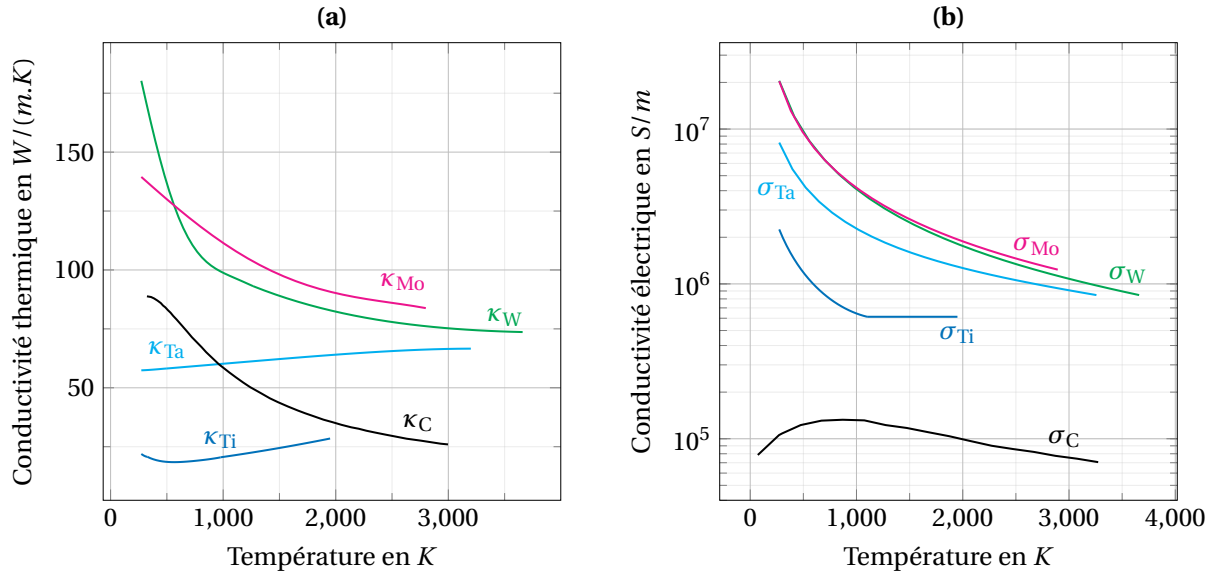


FIGURE H.1 – Tracés des fits polynomiaux utilisés dans notre modèle pour (a) : les conductivités thermiques et (b) : les conductivités électriques. Les références sont données dans le texte.

## Références de l'annexe H

- [1] Henry L. LAQUER. *Low Temperature Thermal Expansion of Various Materials*, rapp. tech. TECHNICAL INFORMATION SERVICE (AEC) OAK RIDGE TN, déc. 1952. Chap. Technical Reports (cf. p. 205).
- [2] G.K. WHITE et R.B. ROBERTS. « Thermal Expansion of Reference Materials : Tungsten and  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ». In : *High Temperatures - High Pressures* 15.3 (1983), p. 321-328. ISSN : 0018-1544 (cf. p. 205).
- [3] F. C. NIX et D. MACNAIR. « The Thermal Expansion of Pure Metals. II : Molybdenum, Palladium, Silver, Tantalum, Tungsten, Platinum, and Lead ». In : *Physical Review* 61.1-2 (jan. 1942), p. 74-78. DOI : [10.1103/PhysRev.61.74](https://doi.org/10.1103/PhysRev.61.74) (cf. p. 205).
- [4] R G SHEPPARD et al. « Properties and Characteristics of Graphite ». In : *Poco Graphite, Inc* (fév. 2002), p. 53 (cf. p. 205).
- [5] Bonnie J. MCBRIDE. *Thermodynamic Data for Fifty Reference Elements*. National Aeronautics and Space Administration, Glenn Research Center, 2001 (cf. p. 205).
- [6] G. K. WHITE et S. J. COLLOCOTT. « Heat Capacity of Reference Materials : Cu and W ». In : *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 13.4 (oct. 1984), p. 1251-1257. ISSN : 0047-2689. DOI : [10.1063/1.555728](https://doi.org/10.1063/1.555728) (cf. p. 205).
- [7] P. D. DESAI. « Thermodynamic Properties of Manganese and Molybdenum ». In : *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 16.1 (jan. 1987), p. 91-108. ISSN : 0047-2689. DOI : [10.1063/1.555794](https://doi.org/10.1063/1.555794) (cf. p. 205).
- [8] C. Y. HO, R. W. POWELL et P. E. LILEY. « Thermal Conductivity of the Elements ». In : *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 1.2 (avr. 1972), p. 279-421. ISSN : 0047-2689, 1529-7845. DOI : [10.1063/1.3253100](https://doi.org/10.1063/1.3253100) (cf. p. 205).

- [9] L. BINKELE. « The High-Temperature Lorenz Number of Tungsten; an Analysis of Recent Results on the Thermal and Electrical Conductivity over the Temperature Range 300 to 1300 K ». In : *High Temperatures - High Pressures* 15.5 (1983), p. 525-531. ISSN : 0018-1544 (cf. p. 205).
- [10] Timothy D. BURCHELL et Tsvetoslav R. PAVLOV. « Graphite : Properties and Characteristics ». en. In : *Comprehensive Nuclear Materials*. Elsevier, 2020, p. 355-381. ISBN : 978-0-08-102866-7. DOI : [10.1016/B978-0-12-803581-8.11777-1](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.11777-1). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128035818117771> (visité le 08/10/2020) (cf. p. 205).
- [11] Nenad D. MILOŠEVIĆ et Kosta D. MAGLIĆ. « Thermophysical Properties of Solid Phase Titanium in a Wide Temperature Range ». In : *High Temperatures-High Pressures* 37.3 (jan. 2008), p. 187-204 (cf. p. 205).
- [12] P. D. DESAI et al. « Electrical Resistivity of Selected Elements ». In : *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 13.4 (oct. 1984), p. 1069-1096. ISSN : 0047-2689. DOI : [10.1063/1.555723](https://doi.org/10.1063/1.555723) (cf. p. 205).
- [13] Herbert B MICHAELSON. « The Work Function of the Elements and Its Periodicity ». In : *J. Appl. Phys.* 48.11 (1977), p. 6 (cf. p. 205).
- [14] L. W. SWANSON et L. C. CROUSER. « Total-Energy Distribution of Field-Emitted Electrons and Single-Plane Work Functions for Tungsten ». In : *Physical Review* 163.3 (nov. 1967), p. 622-641. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.163.622](https://doi.org/10.1103/PhysRev.163.622) (cf. p. 205).
- [15] Masashi SHIRAISHI et Masafumi ATA. « Work Function of Carbon Nanotubes ». In : *Carbon* 39.12 (oct. 2001), p. 1913-1917. ISSN : 0008-6223. DOI : [10.1016/S0008-6223\(00\)00322-5](https://doi.org/10.1016/S0008-6223(00)00322-5) (cf. p. 205).





## Annexe I

# Calcul de $F_{2D}$ par la fonction $\mathcal{W}$ de Lambert

Cette annexe détaille le développement analytique qui permet de remonter à la distribution radiale de champ  $F(r)$  à l'origine d'une densité de courant quelconque  $J(r)$ , en utilisant la formule de Murphy et Good pour la densité de courant. C'est ce raisonnement qui est utilisé au chapitre 5 pour établir l'équation 5.12.

La formule de Murphy et Good pour la densité de courant avec l'approximation de Spindt pour les fonctions elliptiques s'écrit (cf. Eq. E.7 et E.8) :

$$J(F) = \frac{C_1 F^2}{\varphi t_0^2} \exp\left(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F} v_0 + \frac{C_2}{C_3 \sqrt{\varphi}}\right) \quad (I.1)$$

En posant

$$A := \frac{C_1}{\varphi t_0^2} \exp\left(\frac{C_2}{C_3 \sqrt{\varphi}}\right) \quad (I.2)$$

on peut réécrire l'équation I.1 sous la forme :

$$F^2(r) \exp\left(-C_2 \frac{\varphi^{3/2}}{F(r)} v_0\right) = \frac{J(r)}{A} \quad (I.3)$$

Pour simplifier le développement mathématique, posons encore

$$\begin{aligned} B &:= C_2 \varphi^{3/2} v_0 \\ C &:= J(r) / A \end{aligned} \quad (I.4)$$

et remplaçons notre inconnu  $F(r)$  par  $x$ . À  $r$  fixé, nous obtenons ainsi l'équation :

$$x^2 \exp\left(-\frac{B}{x}\right) = C \quad (I.5)$$

Résolvons maintenant cette équation dans  $\mathbb{R}_+^*$  :

$$\begin{aligned} x^2 \exp\left(-\frac{B}{x}\right) = C &\Leftrightarrow \ln(x^2) - \frac{B}{x} = \ln(C) \\ &\Leftrightarrow \ln(x) - \frac{B}{2x} = \ln(\sqrt{C}) \\ &\Leftrightarrow \ln\left(\frac{x}{\sqrt{C}}\right) = \frac{B}{2x} \end{aligned}$$

Posons dans un premier temps  $X = x/\sqrt{C}$  pour obtenir :

$$X \ln(X) = \frac{B}{2\sqrt{C}} \quad (I.6)$$

puis  $Y = \ln(X)$  dans un second temps :

$$Y \exp(Y) = \frac{B}{2\sqrt{C}} \quad (I.7)$$

La branche principale de la fonction  $\mathcal{W}$  de Lambert ([wikipédia](#)) est justement définie comme la solution pour tout nombre complexe  $z \notin ]-\infty, -\frac{1}{e}]$  de l'équation :

$$\mathcal{W}(z) e^{\mathcal{W}(z)} = z \quad (I.8)$$

Ainsi,  $Y = \mathcal{W}\left(\frac{B}{2\sqrt{C}}\right)$  est solution de l'équation I.7, ce que l'on peut écrire :

$$\begin{aligned} \ln\left(\frac{x}{\sqrt{C}}\right) &= \mathcal{W}\left(\frac{B}{2\sqrt{C}}\right) \\ \Leftrightarrow x &= \sqrt{C} e^{\mathcal{W}\left(\frac{B}{2\sqrt{C}}\right)} \end{aligned}$$

Or, il sort de l'équation I.8 que

$$e^{\mathcal{W}(z)} = \frac{z}{\mathcal{W}(z)}$$

d'où :

$$x = \sqrt{C} \frac{B/(2\sqrt{C})}{\mathcal{W}\left(\frac{B}{2\sqrt{C}}\right)}$$

ce que l'on peut enfin écrire :

$$x = \frac{B}{2\mathcal{W}\left(\frac{B}{2\sqrt{C}}\right)} \quad (I.9)$$

En reprenant les notations physiques de cette thèse, on a donc comme solution à l'équation I.3 une amplitude de champ qui s'écrit :

$$F(r) = \frac{C_2 \varphi^{3/2} \nu_0}{2\mathcal{W}\left(\frac{C_2 \varphi^{3/2} \nu_0}{2} \sqrt{\frac{A}{J(r)}}\right)} \quad (I.10)$$

# Symboles et abréviation

## Liste des symboles

Symbole	Correspondance	Dimension	Valeur / Unité
Constantes fondamentales			
$\epsilon_0$	permittivité du vide	$M^{-1} \cdot L^{-3} \cdot T^4 \cdot I^2$	$8.85 \times 10^{-12} F/m$
$h$	constante de Planck ( $\hbar = h/2\pi$ )	$M \cdot L^2 \cdot T^{-1}$	$6.63 \times 10^{34} J s$
$k_B$	constante de Boltzmann	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2} \cdot \Theta^{-1}$	$1.38 \times 10^{-23} J/K$
$e$	charge élémentaire	$I \cdot T$	$1.60 \times 10^{-19} C$
$m$	masse de l'électron	$M$	$9.11 \times 10^{-31} kg$
$c$	célérité de la lumière dans le vide	$L \cdot T^{-1}$	$3.00 \times 10^8 m/s$
Constantes de l'émission électronique			
$\sigma_*$	$2\pi^5 k_B^4 / 15h^3 c^2$ (const. de Stefan-Boltzmann)	$M \cdot T^{-3} \cdot \Theta^{-4}$	$5.67 \times 10^{-8} W m^{-2} K^{-4}$
$C_1$	$e^3 / 16\pi^2 \hbar$	$M \cdot L^{-2} \cdot T^4 \cdot I^3$	$2.46 \times 10^{-25} [SI]$
$C_2$	$4\sqrt{2m} / 3\hbar e$	$M^{-\frac{1}{2}} \cdot L^{-2} I$	$1.07 \times 10^{38} [SI]$
$C_3$	$4\pi\epsilon_0 / e^3$	$M^{-1} \cdot L^{-3} \cdot T \cdot I^{-1}$	$2.71 \times 10^{46} [SI]$
$\nu$	$\sqrt{2me^2} / 18\pi\hbar\sqrt{\varphi}\epsilon_0$	sans dim.	$6.54 \times 10^{-10} / \sqrt{\varphi} [SI]$
Propriétés matériaux			
$T_F$	température de fusion	$\Theta$	$K$
$\sigma$	conductivité électrique	$M^{-1} \cdot L^{-3} \cdot T^3 \cdot I^2$	$S/m$
$\lambda$	conductivité thermique	$M \cdot L \cdot T^{-3} \cdot \Theta^{-1}$	$W m^{-1} K^{-1}$
$\kappa$	diffusivité thermique	$L^2 \cdot T^{-1}$	$m^2 s^{-1}$
$c$	chaleur spécifique ou capacité thermique massique	$L^2 \cdot T^{-2} \cdot \Theta^{-1}$	$J kg^{-1} K^{-1}$
$C_X$	capacité thermique à X constant	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2} \cdot \Theta^{-1}$	$J K^{-1}$
$\rho$	masse volumique	$M \cdot L^{-3}$	$kg m^{-3}$
$n$	densité volumique classique	$L^{-3}$	$m^{-3}$
$\mu$	potentiel chimique	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\varphi$	travail de sortie	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$e_F$	énergie de Fermi	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\epsilon_F$	niveau de Fermi	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\epsilon_C$	niveau du bas de bande de conduction	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$r_S$	rayon de Wigner-Seitz	$L$	$\text{Å}$ ou $m$
Grandeurs physiques générales			
$T$	température	$\Theta$	$K$
$\phi$	densité de flux de chaleur	$M \cdot T^{-3}$	$W m^{-2}$
$\dot{Q}$	chauffage	$M \cdot L^2 \cdot T^{-3}$	$W$
$Q$	chaleur accumulée	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$

$\tau$	diverses constantes de temps	$T$	$s$
$E$	champ électrique global/appliqué	$M \cdot L \cdot T^{-3} \cdot I^{-1}$	$V/m$
$F$	champ électrique local	$M \cdot L \cdot T^{-3} \cdot I^{-1}$	$V/m$
$j$	densité de courant	$I \cdot L^{-2}$	$A/m^2$
$\psi$	fonction d'onde	sans dim.	–
$\vec{k}$	vecteur d'onde (assimilé au vecteur impulsion $\hbar\vec{k}$ par abus de langage)	$L^{-1}$	$m^{-1}$
$\vec{v}$	vecteur vitesse	$L^{-1}$	$m^{-1}$
$\vec{n}$	vecteur normal à une surface (à ne pas confondre avec les nombres quantiques $n_x, n_y$ et $n_z$ )	sans dim.	–

---

Grandeurs de l'émission électronique

---

$J$	densité de courant émise	$I \cdot L^{-2}$	$A/m^2$
$\mathcal{J}$	densité de courant émise macroscopique (courant émis rapporté à la surface de la source)	$I \cdot L^{-2}$	$A/m^2$
$\mathcal{P}_N$	puissance Nottingham totale	$M \cdot L^2 \cdot T^{-3}$	$\mu W$ ou $mW$
$\mathcal{P}_J$	puissance Joule totale	$M \cdot L^2 \cdot T^{-3}$	$\mu W$ ou $mW$
$\mathcal{P}_\theta$	evacuation totale vers le thermostat	$M \cdot L^2 \cdot T^{-3}$	$\mu W$ ou $mW$
$\Phi_N$	densité de flux de chaleur Nottingham	$M \cdot T^{-3}$	$W/m^2$
$\mathcal{E}_N$	énergie Nottingham	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\langle \epsilon \rangle_e$	énergie moyenne des électrons émis	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\langle \epsilon \rangle_r$	énergie moyenne des électrons de remplacement	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$V_{app}$	différence de potentiel appliqué entre la cathode et l'anode	$M \cdot L^2 \cdot T^{-3} \cdot I^{-1}$	$V$
$V_{app}$	différence de potentiel appliqué entre la cathode et l'anode	$M \cdot L^2 \cdot T^{-3} \cdot I^{-1}$	$V$
$D_{gap}$	distance inter-électrode (entre l'anode et la cathode)	$L$	$m$
$\beta$	renforcement de champ au sommet	sans dim	–
$F_a$	champ local au sommet	$M \cdot L \cdot T^{-3} \cdot I^{-1}$	$V/m$
$I$	courant émis	$I$	$A$
$I_{pb}$	courant émis au champ de préclaquage	$I$	$A$
$E_{pb}$	champ global de préclaquage	$M \cdot L \cdot T^{-3} \cdot I^{-1}$	$V/m$
$E_{min}$	champ global auquel l'émetteur émet un millièème du courant de préclaquage	$M \cdot L \cdot T^{-3} \cdot I^{-1}$	$V/m$
$\Sigma$	Interface entre la cathode (avec les émetteurs) et l'enceinte	$L^2$	$m^2$
$SF$	fonction d'apport ou <i>supply function</i> en anglais	$M^{-1} \cdot L^{-2} \cdot T$	$eV^{-1} nm^{-2} fs^{-1}$
$D$	coefficient de transmission par effet tunnel	sans dim.	–
$\epsilon_V$	niveau du vide	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\epsilon$	énergie totale	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\epsilon_n$	énergie normale	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\epsilon_p$	énergie cinétique parallèle à l'interface	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\nu(\epsilon)/V$	distribution énergétique par unité de volume des états accessibles	$M^{-1} \cdot L^{-5} \cdot T^2$	$\text{\AA}^{-1} eV^{-1}$
$\tilde{N}(\epsilon)$	probabilité d'occupation de Fermi-Dirac	sans dim.	–
$f(\epsilon)$	fonction de distribution énergétique des électrons	$M^{-1} \cdot L^{-5} \cdot T^2$	$\text{\AA}^{-1} eV^{-1}$

$\Delta\varphi$	abaissement Schottky du travail de sortie	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\mathcal{E}(z)$	barrière de potentiel ( $z$ évaluée la distance à l'interface)	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$\mathcal{E}_{\max}$	maximum de la barrière de potentiel	$M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$	$eV$ ou $J$
$y$	ratio entre le sommet de la barrière et l'énergie normale d'un électron incident	sans dim	–
$y_{\star}$	ratio entre l'abaissement Schottky et le travail de sortie	sans dim	–
$\nu(y)$	fonction intervenant dans le calcul du coefficient de transmission	sans dim	–
$t(y)$	fonction définie à partir de la dérivée de $\nu(y)$	sans dim	–
$NED(\epsilon_n)$	fonction de distribution en énergie normale des électrons émis	normalisée	$eV^{-1}$
$TED(\epsilon)$	fonction de distribution en énergie totale des électrons émis	normalisée	$eV^{-1}$
$g_I$	gain relatif en courant dû à l'augmentation de température	sans dim.	–
$\epsilon_I$	écart relatif sur le courant avec et sans couplage thermique ( <i>i.e.</i> contribution relative au courant du couplage thermique)	sans dim.	–
$\epsilon_T$	écart relatif sur la température avec et sans couplage thermique	sans dim.	–
$R_{90\%}$	rayon correspondant à 90% de l'émission (émetteur axisymétrique)	$L$	$m$
<hr/>			
<b>Géométrie</b>			
$H$	hauteur de la base au sommet	$L$	$\mu m$
$R$	rayon à la base d'une hémicellipse	$L$	$\mu m$
$R_s$	rayon de sphère	$L$	$\mu m$ ou $nm$
$R_b$	rayon à la base du cône	$L$	$\mu m$ ou $nm$
$f$	facteur d'aspect $H/R$ ou $H/R_s$	sans dim.	–
$\alpha$	angle de cône	sans dim.	$^\circ$ ou $rad$
$e$	excentricité des hémicellipses (à ne pas confondre avec $e$ la charge élémentaire)	sans dim.	–
$\ell$	abscisse curviligne	$L$	$m$
$\mathcal{C}(r)$	jacobien $d\ell/dr$ entre l'abscisse curviligne et la coordonnée radiale	sans dim.	–
$K$	courbure de Gauss	$L^{-2}$	$m^{-2}$
$r_C$	rayon de courbure défini à partir de la courbure de Gauss	$L$	$m$
<hr/>			
<b>Paramètres de maillage</b>			
$h_{\max}$	taille maximale d'un élément de maille	$L$	$m$
$h_{\min}$	taille minimale d'un élément de maille	$L$	$m$
$h_{\text{grad}}$	rapport maximal entre la taille de deux éléments voisins	sans dim.	–
$h_{\text{curve}}$	rapport entre la taille des éléments à la frontière et le rayon de courbure à cette frontière.	sans dim.	–
$N_{\text{elem}}$	nombre total d'éléments dans le domaine de simulation.	sans dim.	–

## Liste des abréviations

Abréviation	Correspondance	Information supplémentaire
FEF	Field Enhancement Factor	Facteur de renforcement de champ électrique par effet de pointe
FE	Field Emission	Émission électronique par effet de champ
TFE	Thermal Field Emission	Émission de champ thermoassisté ou émission thermochamp
BKW	Brillouin, Kramers, Wentzel	Noms des physiciens à l'origine de l'approximation dite BKW
FEA	Field Emitter Array	Réseau d'émetteur à effet de champ
PECVD	Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition	Déposition en phase vapeur assisté par plasma
Laboratoires		
GeePs	Laboratoire de Génie Électrique et Électronique de Paris	<a href="#">site internet</a>
LPGP	Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas	<a href="#">site internet</a>
GPM	Groupe de Physique des Matériaux	<a href="#">site internet</a>
iLM	institut Lumière Matière	<a href="#">site internet</a>
LCAR	Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité	<a href="#">site internet</a>
G2ELab	Grenoble Génie Electrique	<a href="#">site internet</a>

# Remerciements

*« Parfois, le simple fait de vivre d'écrire est un acte de courage. »*

---

Sénèque

Les doctorants du monde entier

Cette thèse de doctorat aura été ma principale occupation de novembre 2018 à mars 2022. Si le manuscrit que vous tenez entre les mains en constitue l'aboutissement, il est évident qu'il ne saurait rendre pleinement honneur au chemin qui y a mené. De même, bien que seul mon nom figure dans la liste finale de ses auteur-e-s<sup>1</sup>, il est évident que ce document est, comme tout travail de recherche, le fruit d'une interaction bien plus large entre un grand nombre d'êtres humains (et avec leur environnement!).

Puisque je ne saurai remercier ici chacune de ces contributions indirectes à sa juste valeur, j'aimerais simplement rendre hommage à l'ensemble de cette vaste et diffuse toile dont résulte nos vies.

Pour celles et ceux dont la contribution apparaît plus évidente en revanche, j'aimerais adresser directement ma gratitude.

Je remercie cordialement Philippe Dessante à qui le concours des circonstances a fait endosser la direction de ma thèse.

Je remercie bien sûr Tiberiu Minea qui a proposé ce sujet et qui m'a fait confiance pour me l'approprier. Merci pour le temps investi et l'intérêt sincère témoigné pour mon travail. Je trouve remarquable ta capacité à toujours trouver le temps de discuter avec le sourire malgré la charge de travail sans fin qui semble incomber aux directeurs-trices de laboratoires soucieux-se-s.

Merci à Philippe Teste et Romaric Landfried pour le soutien tant pratique que moral dans les moments difficiles de la thèse. Je pense en particulier à l'organisation de la soutenance. Merci aussi pour votre sympathie et les discussions autour de la Recherche.

Merci à Benjamin Sez nec dont j'ai repris la suite des travaux et qui a su me transmettre ses connaissances dans la bonne humeur. Le bureau émission électronique du LPGP aura perduré trois pleines années avec nous!

Je voulais aussi remercier ici l'ensemble des membres du Jury d'avoir accepté de relire le manuscrit. Merci aussi pour la longue discussion le jour de la soutenance qui aura participé à élargir et enrichir ma vision du domaine. Merci en particulier à Bruno Lepetit pour sa lecture attentive. Les discussions qui en ont découlé ont profité à ce manuscrit et profiteront certainement à la suite de ma carrière de chercheur.

---

1. J'utilise dans ce dernier chapitre l'écriture inclusive telle que recommandée dans le manuel du site [www.ecriture-inclusive.fr](http://www.ecriture-inclusive.fr)



Merci à Thierry Devillers, Nicolas Dessaint, Bérénice Saidi, Caroline Charon, Michel Pascanu et Marc Bisson pour le support administratif et informatique, une aide précieuse dans le périlleux voyage du doctorat. S'il est communément admis d'évaluer le prestige d'un laboratoire par la qualité des publications de ses chercheur·e·s, il est dommage que ne soit pas plus prises en compte les compétences de ses équipes administratives. Tou·te·s les chercheur·e·s savent pourtant combien ce point peut être déterminant pour mener à bien un projet de recherche.

Un dernier point aussi souvent négligé et pourtant primordial : une ambiance de laboratoire bienveillante et détendue. Merci donc à l'ensemble de celles et ceux qui y ont contribué, membres permanents ou non. Merci Abderzak, Adrien, Angela, Artem, Benjamin, Erwan, Ines, Quentin, Simona, TJ et ceux-elles que j'oublie. Merci pour toutes ces parties et bonnes rigolades de la pause midi. Merci pour les soirées jeux. Je vous souhaite tout le meilleur pour la suite.

Enfin, j'ai eu l'occasion pendant cette thèse d'encadrer le stage de Ferdaous. Je voudrais ici remercier son investissement et sa rigueur dans la production et l'analyse de résultats. Un travail qui m'a permis d'aller plus loin dans les derniers chapitres de cette thèse.

Au tour maintenant de celles et ceux qui m'ont soutenu depuis l'extérieur.

Ma première pensée va à mes camarades de licence de l'Université Pierre et Marie Curie. Merci d'abord à Victor et Florent dont l'amitié a clairement influencé mon parcours universitaire, de la place Jussieu au 45 rue d'Ulm et jusqu'aux monts enneigés de l'Alaska! Merci aussi à David. Ton dévouement pour la Recherche est inspirant, tout comme ta passion pour l'astrophysique aura été contagieuse. Merci enfin à Alexandre (cet artiste du doctorat!) pour l'ouverture au monde de l'engagement et les discussions politiques. Et surtout, merci pour tous ces bons moments partagés autour de loisirs communs! Il en reste heureusement encore de nombreux à venir.

Je veux remercier aussi Augustin et Julien, rencontrés quelques années plus tôt au cours d'un stage mémorable au Canada. Je pense aussi à Bérengère, ma co-vacataire des enseignements de physique à la faculté de pharmacie de Châtenay-Malabry. Dans les tourments de la thèse, il y a peu de gens qui comprennent aussi bien ce que vous vivez que ceux-elles qui le vivent en même temps que vous. Nos nombreuses discussions autour de la vie en doctorat ont été pour moi autant de petites écluses, régulant la pression.

Merci à Leïla, qui m'a accompagné pendant toute la durée de cette thèse. Aux cotés de qui j'ai grandi, appris, échangé et changé. Merci pour le soutien dans les périodes de vide. Merci pour l'écoute dans les périodes de doute. Merci pour les critiques dans les moments d'égarement. Merci pour les sourires dans les moments complices. Merci pour l'amour dans les moments calmes. Merci pour les rires dans les moments de fêtes. Merci pour tous les souvenirs – tu sais avec quelle aisance je repeints en rose mêmes les moins agréables.

Merci à ma famille enfin, avec qui tout a commencé puisque c'est à mes parents que je dois très certainement mon goût pour la science et mon désir de comprendre. Merci Papa pour le partage de la Physique et des grandes questions qui l'entourent encore. Merci Maman pour ton soutien inconditionnel et ta bienveillance. Merci d'avoir autant aimé participer à notre éducation. Maintenant que ces trois années de thèse m'ont appris à me débarrasser de mon perfectionnisme, je peux enfin apprécier à sa juste valeur cette volonté de bien faire que tu nous a transmise. Mes dernières pensées sont adressées bien évidemment à celui et celles qui partagent ma vie depuis que j'en ai des souvenirs. Malo, Eeva, Moeani, Anahita, si j'ai beaucoup appris pendant cette thèse, c'est à vos côtés que j'ai le plus grandi. C'est souvent dans les moments les plus difficiles que se révèlent les liens affectifs les plus forts. Je vous remercie du fond du cœur pour tout l'amour porté.

Clôturons cet ultime chapitre par un petit jeu. Lorsque j'ai commencé cette thèse en novembre 2018, mes deux ainé-e-s Malo et Eeva étaient encore eux mêmes doctorant-e-s. Pour marquer cette amusante coïncidence, nous avons décidé de concocter une énigme qui formerait un lien entre nos trois thèses. Pour la résoudre, il vous faudra d'abord trouver l'accès au chemin qui y mène. Les clés de chaque manuscrit vous aideront à prendre la bonne direction sur la fin. Voici la mienne :

« On ne comprend que dans un cadre. »

Une fois arrivé-e, tous les titres seront remis en jeu. Déjouez les statistiques pour percer le mystère de la Trinithèse et votre nom entrera dans la toile.

## Références de la Trinithèse

*« La Trinithèse n'est pas une simple superposition, c'est un cycle qui s'entremêle. »*

– Med Emedeem

- [1] Malo MOFAKHAMI. « Étude Des Interactions Entre Dynamiques d'innovation et Qualité de l'emploi : Une Relation Déterminante Au Cœur Des Mutations Du Travail à l'œuvre Au Sein de l'Union Européenne ». Thèse de Doctorat. Paris 1, déc. 2019. URL : <http://www.theses.fr/2019PA01E054>.
- [2] Eeva MOFAKHAMI. « Effets Du Soudage Par Vibration Sur La Microstructure et Le Comportement En Traction de Polymères Semi-Cristallins Renforcés Par Des Fibres de Verre ». Thèse de Doctorat. Paris, HESAM, mars 2020. URL : <http://www.theses.fr/2020HESAE006>.
- [3] Darius MOFAKHAMI. « Modélisation Multiphysique de l'émission Électronique Par Effet de Champ d'une Surface 3D Micro/Nano-Structurée ». Thèse de Doctorat. université Paris-Saclay, mars 2022. URL : <http://www.mofakhami.site/trinithese.fr/s213383>.





À ma famille, mon frère et mes soeurs bien-aimé·e·s,  
Étoiles des années passées et de celles qui viennent.  
Depuis Bourg-la-Reine vers Buthiers et *back again*,  
à Bordeaux, et jusqu'aux rives de Papeete.

**Titre :** Modélisation multiphysique de l'émission électronique par effet de champ d'une cathode micro/nano-structurée en 3D

**Mots clés :** modélisation numérique, émission électronique, matière condensée, claquage électrique, décharge plasma

**Résumé :** Cette thèse développe un modèle d'émission électronique par effet de champ pour simuler l'émission d'électrons par effet tunnel rendue possible par le renforcement de champ électrique au sommet de structures micro/nanométriques distribuées à la surface d'une cathode.

Plus spécifiquement, l'étude porte sur l'autoéchauffement des structures émettrices par l'action combinée des effets Joule et Nottingham qui accompagnent l'émission. Lorsque le champ local atteint plusieurs gigavolts par mètre, la boucle de rétroaction positive entre courant et température peut causer la destruction thermique des émetteurs. Ce phénomène réduit la durée de vie des sources d'électrons basées sur des réseaux d'émetteurs et peut être à l'origine d'un claquage électrique dommageable pour les machines opérant sous vide à très haute tension. En résolvant temporellement par la méthode des éléments finis les équations couplées de la chaleur et du courant, les simulations offrent un éclairage nouveau sur l'évolution de l'émission électronique.

En particulier, une analyse paramétrique approfondie a permis de mettre en évidence un phénomène de bistabilité thermique, non documenté jusqu'ici. Cette bistabilité est reliée à un emballement de l'effet Joule ensuite amorti par l'effet Nottingham devenu refroidissant. Lorsque l'amortissement est insuffisant, l'instabilité résistive cause la destruction prématurée des émetteurs, comme observé pour le cas d'émetteurs nanométriques en carbone dont les propriétés s'approchent de la situation expérimentale d'une source d'électron actuellement en développement.

En parallèle, une étude des interactions électriques et thermiques entre émetteurs proches a abouti sur une méthode efficace de réduction de dimension 3D vers  $N \times 2D$  pour simplifier la simulation de l'autoéchauffement d'un grand nombre  $N$  d'émetteurs axisymétriques. Cette méthode pourrait permettre de généraliser la prise en compte de l'autoéchauffement dans ce type de configuration.

**Title :** Multiphysics 3D modelling of the field electron emission from a micro/nano-structured cathode

**Keywords :** numerical modelling, electron emission, condensed matter physics, electrical breakdown, plasma discharge

**Abstract :** This thesis develops a field electron emission model to simulate the emission of electrons by quantum tunneling enabled by the local field enhancement around the apex of micro/nanostructures located at a cathode surface.

The study focuses more specifically on the self-heating of the emitting structures caused by the combined action of the Joule and Nottingham effects that come along with the electric current. When the local field reaches several gigavolts per meter, the positive feedback loop between current and temperature can cause the thermal destruction of the emitters. This phenomenon reduces the lifetime of electron sources that are based on field emitter arrays and can also be the cause of an electrical breakdown damaging ultra-high-voltage vacuum devices. By solving in time the coupled heat and current equations using a finite element method, the simulations offer new insights into the evolution of the electron emission.

In particular, a thorough parametric analysis has unveiled for some specific cases the occurrence of a previously undocumented thermal bistability. This bistability is related to the runaway of the Joule effect and its subsequent damping by a cooling Nottingham effect. When the latter is not cooling enough, the resistive instability becomes the root of the emitter thermal destruction, as observed for carbon nanometric emitters whose properties approximate the experimental situation of an electron source currently under development.

In parallel, a study of the electrical and thermal interactions between nearby emitters enabled us to develop an efficient method of dimension reduction from 3D to  $N \times 2D$  to ease the simulation of the self-heating of a large number  $N$  of axisymmetric emitters. This method could help to systematically take into account the emitter self-heating in such configurations.