



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace

Présentée et soutenue par :

Rémi PACAUD

le jeudi 13 décembre 2018

Titre :

Étude et modélisation numérique de l'effet des radiations spatiales sur
l'évolution des propriétés physiques et électriques des matériaux
embarqués

École doctorale et discipline ou spécialité :

ED GEET : Génie électrique

Unité de recherche :

Équipe d'accueil ISAE-ONERA OLIMPES

Directeur(s) de Thèse :

M. Thierry PAULMIER (directeur de thèse)

M. Pierre SARRAILH (co-directeur de thèse)

Jury :

Mme Isabelle ROYAUD Professeur Université de Lorraine - Présidente

M. Thierry PAULMIER Ingénieur de recherche ONERA - Directeur de thèse

M. Serge AGNEL Professeur Université Montpellier 2 - Rapporteur

M. Omar J'BARA Professeur Université de Reims Champagne - Rapporteur

M. Pierre SARRAILH Ingénieur ONERA - Co-directeur de thèse

M. Gilbert TEYSSERE Directeur de Recherche LAPLACE

Remerciements

Je remercie l'ONERA et la région Occitanie qui ont rendu possible, par leurs financements, ces travaux de recherche. Je remercie également le CNES (Centre National d'Etudes Spatiales) pour son aide technologique et financière, qui a permis de mener à bien et d'approfondir mes travaux de recherches.

Je voudrais ensuite remercier chaleureusement Isabelle Royaud (Professeure à l'Université de Lorraine) pour avoir présidé mon jury de soutenance de thèse, Omar Jbara (Professeur à l'Université de Reims) et Serge Agnel (Professeur à l'Université de Montpellier) pour avoir rapporté mon manuscrit, Gilbert Teyssède (Directeur de recherches au CNRS, LAPLACE) et Denis Payan (Spécialiste Charging et Décharges électrostatiques au CNES) pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse. Je remercie l'ensemble des membres du jury pour cet échange scientifique très enrichissant.

Ces travaux de thèse ont été réalisables grâce au soutien inconditionnel de mes deux directeurs de thèses, Thierry Paulmier et Pierre Sarrailh. Leur apport scientifique fût d'une importance considérable. Leur disponibilité et leur aide continue m'ont toujours permis de m'améliorer et de me remettre en question. Je tiens également à noter que l'humanisme et le soutien dont Thierry et Pierre ont fait preuve m'ont aidé à surmonter les différentes épreuves rencontrées lors de cette thèse.

Je remercie vivement le département DPHY pour sa bonne humeur à toute épreuve, avec laquelle ces trois années de thèse ont pu être menées dans de remarquables conditions. Je remercie donc logiquement les organisatrices (Angelica et Virginie) des multiples événements du département, qui ont permis de souder et rapprocher l'équipe, mais aussi chaque personne ayant participé à ces mêmes événements, les rendant inoubliables.

Je remercie les différentes générations de doctorants avec qui j'ai partagé d'incroyables moments. Tout d'abord la promotion de 2014, composée du trio à feuillets qu'aucune chaîne de télévision n'a réussi à égaler : Rémi Bénacquista dans le rôle du nageur, Marie-Cécile Ursule dans le rôle de la boxeuse et Damien Herrera dans le rôle du magicien (à ne pas manquer) ; Antoine Brunet, pour tes superbes contrepèteries et ton humour au n-ième degré ; Thomas Rousselin, pour nos discussions toujours improbables mais fascinantes ; Nicolas Fil, pour ton énergie débordante et ta positivité sans limite.

Ensuite, la promotion 2015, composée de Marc Villemant, Marina Gruet, Oriol Jorba-Ferro et Quentin Nénon. Merci, Marc, pour ta gentillesse, ta générosité, toutes ces sessions d'escalade et ton soutien important lors de cette dernière année. Merci à toi, Marina, pour ta

bonne humeur à toute épreuve. Je ne crois pas t'avoir déjà vu sans le sourire. Quentin, tu as été mon premier voisin de bureau, avec qui j'ai partagé les premières expériences de la thèse. Ton tact légendaire restera pour moi inégalé et ta bonne humeur ainsi que tes blagues d'exceptions seront inoubliées ! Oriol, équipe Osaka, tant de générosité, prêt à tout pour octroyer un après-midi de libre au département. Merci pour nos discussions improbables et nos parties de coïncidences sans limites à l'autre bout de la planète.

Finalement, je remercie les promotions 2016 et 2017, composées de Charles Rigoudy, Pauline Oudayer, Guillaume Demol, Pablo Caron, Kévin Lemièrre, Marine Ruffenach et bien d'autres. Charles, merci pour ton humanité, ton soutien et probablement l'expérience de voyage la plus intéressante que j'ai faite ! Merci Pauline, pour nos sujets de discussions qui sont devenus de plus en plus improbables avec les années. Tu as toujours fait preuve d'une créativité imbattable et en constante évolution. Merci au fabuleux duo de farceurs, Guillaume et Pablo, ainsi qu'à Kévin et Marine, pour votre bonne humeur permanente. Je ne peux que vous souhaiter une excellente thèse et la meilleure réussite possible.

Et enfin, merci à Abdessamad Ben-Zaid, mon dernier voisin de bureau, pour ta très bonne humeur et ton soutien lors de cette dernière année de thèse ! Tu es consciencieux et je suis convaincu que tu feras une excellente thèse.

Mes remerciements vont également à ma famille, mes parents et mon frère, pour leur soutien perpétuel dans chaque situation, passée, présente et future.

Je finis par cette citation d'Oscar Wilde : « Il faut toujours viser la lune, car même en cas d'échec, on atterrit dans les étoiles ».

Sommaire

Remerciements	3
Sommaire	5
Nomenclature	11
Introduction générale	16
CHAPITRE 1. Interaction entre un satellite et son environnement : introduction à la physique de l'interaction électron-matière et du transport de charges	20
1.1 Interaction satellite – environnement spatial	20
1.1.1 L'environnement spatial.....	20
1.1.2 Satellites : présentation et applications	22
1.1.3 Couplage d'un satellite avec son environnement	25
1.1.3.1 Charge d'un satellite.....	25
1.1.3.2 Risques de décharges électrostatiques.....	27
1.1.4 Comprendre et prédire le comportement électrostatique.....	31
1.2 Physique de l'interaction électron-polymère et du transport de charges.....	32
1.2.1 Théorie des bandes	32
1.2.2 Physique de l'interaction électron-polymère.....	33
1.2.2.1 Dépôt de dose des électrons dans la matière et ionisation du matériau.....	33
1.2.2.2 Implantation des électrons.....	38
1.2.3 Ecoulement des charges	39
1.2.3.1 Piégeage et dé-piégeage	39
1.2.3.2 Diffusion et conduction	41
1.2.3.3 Recombinaison	44
1.2.3.4 Interfaces	45
1.3 Conclusion.....	47
CHAPITRE 2. Les modèles de l'interaction électron-matière et du transport de charges dans les polymères	49

2.1 Modèle de l'électrostatique : système Poisson-Ohm	49
2.2 Modèles de l'interaction électron-matière.....	54
2.2.1 Approche probabiliste : méthode Monte-Carlo.....	54
2.2.2 Approche semi-empirique	56
2.2.3 Comparaison de la méthode Monte-Carlo aux équations déterministes semi-empiriques	60
2.3 Modèles du calcul de conductivité	61
2.3.1 Modèle de Fowler.....	62
2.3.2 Modèle de Génération-Recombinaison	64
2.3.2.1 Modèle de Génération-Recombinaison sans effet du champ électrique et de la température.....	64
2.3.2.2 Modèle de Génération-Recombinaison simplifié sans effet du champ électrique et de la température	66
2.3.2.3 Modèle de Génération-Recombinaison simplifié avec effet du champ électrique et de la température	66
2.3.2.3.1 Génération de paires électron-trou	66
2.3.2.3.2 Mobilité des charges : pièges peu profonds	67
2.3.2.3.3 Temps caractéristique de dé-piégeage des charges : pièges profonds.....	68
2.3.3 Modèle d'hopping : alternative pour le calcul de la mobilité ?	69
2.3.4 Comparaison des différents modèles.....	71
2.4 Construction du modèle THEMIS.....	71
2.4.1 Le modèle de Résistance-Capacité.....	71
2.4.2 Le modèle THEMIS	72
2.4.2.1 Description en volume	72
2.4.2.2 Description aux interfaces	73
2.4.2.3 Résumé des caractéristiques du modèle THEMIS	75
2.5 Conclusion.....	76
CHAPITRE 3. Modélisation du transport de charges de deux polymères – Conductivité constante avec le champ électrique	79
3.1 Implémentation du modèle THEMIS	79

3.1.1 Création du maillage	79
3.1.2 Discrétisation et schéma numérique.....	81
3.1.2.1 Densités de charges	81
3.1.2.2 Courants de conduction et de diffusion.....	82
3.1.2.3 Potentiel électrostatique	84
3.1.3 Vérification numérique de la discrétisation : convergence	86
3.1.4 Diagramme fonctionnel de THEMIS	87
3.2 Validation du modèle THEMIS à deux polymères utilisés en environnement spatial.....	88
3.2.1 Moyen d'irradiation et protocole expérimental.....	90
3.2.1.1 Moyen d'irradiation.....	90
3.2.1.2 Protocole expérimental.....	92
3.2.2 Comportement du Téflon® FEP	93
3.2.2.1 Irradiations successives : analyse des densités de charges.....	93
3.2.2.1.1 Description des résultats : analyse des différences entre les données expérimentales et les résultats de THEMIS	93
3.2.2.1.2 Analyse du comportement des charges dans le Téflon® FEP sur la base des résultats numériques de THEMIS	96
3.2.2.2 Irradiations continues : analyse du potentiel de surface	101
3.2.2.2.1 Description des résultats : analyse des différences entre les données expérimentales et les résultats de THEMIS	102
3.2.2.2.2 Analyse du comportement des charges dans le Téflon® FEP sur la base des résultats numériques de THEMIS	103
3.2.2.2.2.1 1 ^{ère} phase du potentiel de surface	103
3.2.2.2.2.2 2 ^{ème} phase du potentiel de surface	109
3.2.2.2.2.3 3 ^{ème} phase du potentiel de surface	110
3.2.2.3 Incertitudes sur l'extraction des paramètres matériau	113
3.2.3 Comportement du Kapton® HN	115
3.2.3.1 Description des résultats : analyse des différences entre les données expérimentales et les résultats de THEMIS	115

3.2.3.2 Analyse du comportement des charges dans le Kapton® HN sur la base des résultats numériques de THEMIS : comparaison avec le Téflon® FEP	116
3.2.3.2.1 1 ^{ère} phase du potentiel de surface	116
3.2.3.2.2 2 ^{ème} phase du potentiel de surface	118
3.2.3.3 Incertitudes sur l'extraction des paramètres.....	118
3.2.3.4 Etude du Kapton® HN : vers une amélioration du modèle THEMIS.....	118
3.3 Conclusion.....	119
CHAPITRE 4. Prise en compte de l'effet du champ électrique sur la conductivité des charges dans le modèle THEMIS	123
4.1 Mise en évidence de l'effet du champ électrique dans le Kapton® HN	123
4.1.1 Protocole expérimental : Kapton® HN	124
4.1.2 Phénoménologie : mise en évidence de l'effet du champ électrique sur la génération et le transport des charges	127
4.1.2.1 Présentation de l'expérience 1 : Mesure de courant – Irradiation faible flux et longs temps.....	127
4.1.2.2 Présentation de l'expérience 2 : Mesure de courant – Irradiation faible flux et courts temps	129
4.1.2.3 Présentation de l'expérience 3 : Mesure de courant – Irradiation fort flux et très courts temps	132
4.1.2.4 Analyse de l'effet du champ électrique en utilisant les expériences 1 et 2	133
4.2 Analyse et prise en compte de l'effet du champ électrique dans le modèle THEMIS sur le Kapton® HN	138
4.2.1 Effets du champ électrique sur la génération de paires électron-trou et sur les charges piégées peu profondément : application à la conductivité.....	139
4.2.1.1 Loi de type Poole-Frenkel : détermination de β	139
4.2.1.2 Théorie d'Onsager : détermination de r_0 et φ_0	140
4.2.1.3 Prise en compte de la théorie d'Onsager et de la loi de type Poole-Frenkel : application à la conductivité.....	145
4.2.2 Effets du champ électrique sur les pièges profonds : application aux niveaux de potentiel.....	149

4.2.2.1 Phénomènes de dé-piégeage des charges en provenance des pièges profonds assistés par effet du champ électrique : théorie de Poole-Frenkel.....	149
4.2.2.2 Application aux niveaux de potentiel.....	149
4.3 Evolution de la structure de l'algorithme et du diagramme fonctionnel de THEMIS	152
4.3.1 Evolution de la structure de l'algorithme de THEMIS	152
4.3.2 Evolution du diagramme fonctionnel de THEMIS	154
4.4 Conclusion.....	155
CHAPITRE 5. Etude de la charge interne et méthodologie d'extraction des propriétés électriques des polymères.....	158
5.1 Etude de la charge interne de quatre polymères.....	159
5.1.1 Outils numériques existants pour l'étude de la charge interne	159
5.1.1.1 THEMIS face à MCICT, NUMIT et DICTAT	160
5.1.1.2 THEMIS face à SPIS-IC	161
5.1.2 Etude expérimentale, comparaisons avec les résultats du modèle THEMIS	163
5.1.3 Origines des différences entre résultats expérimentaux et numériques.....	164
5.2 Méthodologie pour la caractérisation des propriétés électriques des polymères dans le cadre de la charge interne.....	166
5.2.1 1 ^{ère} étape : extraction de τn et τnt – Mesure du potentiel de surface et irradiation basse énergie	168
5.2.2 2 ^{ème} étape : extraction de μn , μp , β , $r0$ et τp – Mesure de courant et irradiation haute énergie/faible flux/temps courts	170
5.2.3 3 ^{ème} étape : extraction de $\varphi 0$ et confirmation de τn – Mesure de courant et irradiation haute énergie/fort flux/temps courts.....	172
5.2.4 4 ^{ème} étape : extraction de τp , τpt , βPF , $\alpha 1$, $\alpha 2$ et $\alpha 3$ – Mesure du potentiel de surface et irradiation avec faisceau de basse et haute énergie.....	173
5.2.5 5 ^{ème} étape : confirmation de τn , τp , τnt , τpt , μn , μp – Mesure de la densité totale de charges et irradiations successives en faisceaux mono-énergétiques	175
5.2.6 6 ^{ème} étape : confirmation de l'extraction de l'ensemble des paramètres	175
5.3 Extrapolation numérique du comportement en charge d'un matériau connu : le Kapton® HN176	
5.3.1 Protocole d'irradiation.....	176

5.3.2 Niveaux de potentiel, de champ électrique et de conductivité	177
5.3.3 Analyse des risques de décharges électriques	181
5.4 Conclusion.....	181
Conclusion et perspectives	184
Annexe	189
Bibliographie.....	201

Nomenclature

A	Paramètre empirique pour le calcul du rayon extrapolé R_{ex} [g.keV.cm ⁻²]
a	Paramètre empirique pour le calcul de la probabilité de transmission η [sans unité]
α	Coefficient de recombinaison [m.s ⁻¹]
$\alpha_{n_t p}$	Coefficient de recombinaison entre les électrons piégés et les trous libres [m.s ⁻¹]
α_{np}	Coefficient de recombinaison entre les électrons libres et les trous libres [m.s ⁻¹]
α_{np_t}	Coefficient de recombinaison entre les électrons libres et les trous piégés [m.s ⁻¹]
B	Paramètre empirique pour le calcul du rayon extrapolé R_{ex} [sans unité]
b	Paramètre empirique pour le calcul de la probabilité de transmission η [sans unité]
β	Coefficient représentatif de l'effet du champ électrique sur le dé-piégeage des charges [m ^{1/2} .V ^{-1/2}]
β_{PF}	Coefficient de Poole-Frenkel [m ^{1/2} .V ^{-1/2}]
C	Paramètre empirique pour le calcul du rayon extrapolé R_{ex} [keV ⁻¹]
C_p	Capacité du polymère [F]
d	Epaisseur du matériau [m]
δ	Distance de saut caractéristique entre deux pièges consécutifs [m]
Δ	Paramètre empirique pour le calcul de la conductivité induite sous irradiation [sans unité]
Δ_{x_i}	Distance entre deux nœuds consécutifs du maillage d'un matériau [m]
$\Delta_{x_{i+1/2}}$	Distance entre deux inter-nœuds consécutifs du maillage d'un matériau [m]
Δ_{x_0}	Distance entre les deux premiers nœuds du maillage d'un matériau [m]
$\Delta_{x_{max}}$	Distance maximale autorisée entre deux nœuds du maillage d'un matériau [m]
D_n	Coefficient de diffusion des électrons [m ² .s ⁻¹]
D_p	Coefficient de diffusion des électrons [m ² .s ⁻¹]
Dose	Dose déposée dans le matériau [Gy]
E	Champ électrique [V.m ⁻¹]

e	Charge élémentaire [C]
E_g	Energie de gap du matériau [eV]
ε	Permittivité du milieu [F/m]
ε_0	Permittivité du vide [F/m]
ε_r	Permittivité relative [sans unité]
η	Probabilité de transmission des électrons dans chaque sous-couche dx du matériau [sans unité]
f_a	Fraction d'électrons associée à l'élément atomique a [sans unité]
φ	Probabilité pour un électron d'échapper à la recombinaison géminée [sans unité]
φ_0	Rendement de production de paires d'ions thermalisés par électron absorbé [sans unité]
g	Génération de paires électron-trou [$C.m^{-1}.s^{-1}$]
Γ	Flux de déplacement des charges [m^{-1}]
I	Courant des charges [$A.m^2$]
i	Indice pour chaque nœud du maillage d'un matériau [sans unité]
J	Densité de courant des charges [A]
J_0	Densité de courant d'électrons incidents [A]
J_{vol}	Densité de courant d'électrons en volume du matériau [A]
J_{ES}	Densité de courant d'électrons secondaires [A]
J_S	Densité de courant de fuite surfacique [A]
k_b	Constante de Boltzmann [$J.K^{-1}$]
λ	Energie moyenne nécessaire pour qu'un électron puisse sauter d'un piège à un autre [eV]
m	Indice de discrétisation temporel [sans unité]
μ_n	Mobilité effective des électrons [$m^2.V^{-1}.s^{-1}$]
μ_p	Mobilité effective des trous [$m^2.V^{-1}.s^{-1}$]
ϑ_{ph}	Fréquence de vibration du réseau atomique [s^{-1}]
n	Densité des électrons libres [$C.m^{-1}$]

n_t	Densité des électrons piégés [C.m^{-1}]
p	Densité des trous libres [C.m^{-1}]
p_t	Densité des trous piégés [C.m^{-1}]
R	Résistance du matériau [Ω]
R_{ex}	Rayon extrapolé [kg.m^{-2}]
r_0	Rayon de thermalisation [m]
ρ	Densité totale des charges [C]
S	Terme source d'ajout ou de perte de charges [m^{-1}]
σ	Conductivité [$\Omega^{-1}.\text{m}^{-1}$]
σ_{RIC}	Conductivité induite sous irradiation [$\Omega^{-1}.\text{m}^{-1}$]
t	Temps [s]
τ_n	Temps caractéristique de piégeage des électrons libres [s^{-1}]
τ_p	Temps caractéristique de piégeage des trous libres [s^{-1}]
τ_{nt}	Temps caractéristique de dé-piégeage des électrons piégés [s^{-1}]
τ_{pt}	Temps caractéristique de dé-piégeage des trous piégés [s^{-1}]
W	Energie de l'électron incident [keV]
W_r	Energie résiduelle de l'électron, quand il traverse le matériau [keV]
x_i	Position d'un nœud dans le maillage d'un matériau [m]
Z	Numéro atomique [sans unité]

Notification et précision sur les unités choisies : Le modèle développé lors de ce travail de doctorat est un modèle en 1D. Par cohérence, je n'ai pas choisi pour les charges (électrons et trous) une densité volumique C.m^{-3} , mais une densité linéique C.m^{-1} . Ce choix impacte les unités de certaines grandeurs, telles que les densités de courant ou la génération de paires électron-trou. En 3D, ces dernières seraient respectivement en A.m^{-2} (densité de courant) et en $\text{C.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ (génération de paires électron-trou). En 1D, les unités sont en A et en $\text{C.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$. Une analyse dimensionnelle du système d'équations de la partie 2.4.2.1 permet de déduire les unités de chaque grandeur. Cependant, ce choix ne change pas la valeur de la densité de courant prise en entrée du modèle THEMIS. A titre d'exemple, si un flux d'électrons

expérimental de 50 pA/cm^2 est appliqué sur un matériau, le modèle THEMIS prend en entrée la valeur de densité de courant incident 50, dont l'unité est le pA. Cela correspond à une valeur de $10^{18} \text{ m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ pour la génération de paires électron-trou, soit $10^{16} \text{ cm}^{-1}.\text{s}^{-1}$ et donc $10^{16} \text{ cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$ si on raisonne à nouveau en 3D.

Introduction générale

En 1957, Spoutnik est le premier satellite envoyé dans l'espace par l'agence spatiale russe. Dans les années qui suivent, des centaines de satellites sont envoyés en orbite autour de la Terre, par différentes agences et industriels du spatial, pour répondre aux enjeux technologiques croissants. Ces satellites sont d'abord utilisés comme moyens de télécommunication (Echo et Telstar 1), puis leur utilisation se diversifiera avec le temps, et en fonction de l'orbite qu'ils occupent (orbites basses, moyennes ou hautes). Ils sont maintenant fabriqués pour aider à la navigation, la cartographie, la météorologie (Aeolus qui est le dernier lancement en date par l'ESA en août 2018), l'observation scientifique d'objets célestes et bien d'autres domaines. Actuellement, plusieurs milliers de satellites sont en activité autour de la Terre. Leur durée de vie, qui s'étend généralement de dix à quinze ans en orbite géostationnaire, est limitée par l'épuisement de leur source d'énergie. Elle est également réduite par l'effet de l'environnement spatial, hostile pour les satellites, qui conduit parfois à la défaillance ou la destruction de certains composants ou sous-systèmes.

L'environnement spatial est constitué de particules radiatives, telles que les électrons ou les protons, avec des énergies et des flux variés, qui impactent les satellites. A faible énergie, ces particules chargent les matériaux de surface, situés sur les surfaces extérieures du satellite, tels que les panneaux solaires et les revêtements thermiques. On parle, dans la communauté spatiale, de la charge de surface du satellite. A haute énergie, les particules traversent les premières couches du satellite et s'implantent en son cœur, où réside l'électronique sensible. On parle de charge interne. Il existe, à bord des satellites, différents types de matériaux. Parmi ceux-ci, on distingue les diélectriques à usage spatial avec une structure polymérique. Ils sont fréquemment utilisés pour leurs bonnes propriétés thermiques et mécaniques. Il s'agit par exemple de fluoroéthylène propylène (FEP), de polyimide, de polyetheretherketone (PEEK) ou de résines epoxy. Ces matériaux sont électriquement très résistifs et les particules qui les impactent génèrent de hauts niveaux de potentiels et induisent une charge différentielle avec les métaux adjacents, ce qui peut conduire à l'occurrence de décharges électriques. Dans le cas de la charge interne, ces décharges peuvent être critiques, car elles sont susceptibles d'affecter directement l'électronique sensible. En fonction de leur énergie et courant, les décharges électriques peuvent détruire certains matériaux et nuire au bon fonctionnement de la mission.

Pour comprendre les risques d'occurrences de ces décharges et pouvoir les prédire, il est nécessaire d'étudier les phénomènes physiques qui gouvernent les cinétiques des niveaux de

charges, soient les valeurs du potentiel et du champ électrique dans les matériaux. Ces phénomènes sont l'interaction électron-matière et le transport de charges. L'interaction électron-matière conduit à l'implantation d'électrons dans le matériau, qui augmentent les niveaux de potentiels et de champs électriques. L'irradiation mène également, par ionisation, à la création de charges libres, qui se déplacent par effet de champ électrique. L'implantation, l'ionisation et le déplacement des charges régulent les niveaux de potentiels. Dans la communauté du spatial, les deux derniers phénomènes sont référencés par le terme RIC (pour Radiation Induced Conductivity) ou conductivité induite par les radiations.

L'objectif de ce travail de thèse est de comprendre les mécanismes physiques microscopiques qui gouvernent l'interaction électron-matière et le transport de charges, afin de l'appliquer au cas de la charge interne et de la charge de surface. Pour analyser ces phénomènes, il est nécessaire de construire un modèle physique qui en est représentatif. Le modèle développé dans le cadre de cette étude s'appelle THEMIS pour Transport of Holes and Electrons Model for Irradiation in Space. Il a ensuite été validé à l'aide d'expériences spécifiques sur deux polymères utilisés en environnement spatial : le Téflon® FEP et le Kapton® HN. L'étude menée sur ces derniers a permis de déterminer leurs propriétés électriques et d'extrapoler numériquement leur comportement en charge sous irradiation représentative. Au final, le modèle THEMIS a été appliqué au cas de la charge interne en extrapolant les résultats expérimentaux à des cas plus proches du phénomène dans l'espace (temps plus longs et spectre distribué en énergies) et à la charge de matériaux non-étudiés précédemment. Ces derniers cas ont permis de mettre en évidence les limitations liées à la méconnaissance des propriétés des matériaux. Un protocole d'extraction de propriété matériau utilisable dans de futures études a ainsi été proposé au cours de cette étude. Cette démarche a permis de répondre aux objectifs de ce travail de thèse et est décrit dans les différents chapitres de ce document.

Le chapitre I décrit l'environnement spatial dans lequel évoluent les satellites, ainsi que les mécanismes physiques qui gouvernent les niveaux de charges des polymères sous irradiation. Les évolutions temporelles et spatiales des niveaux de potentiels, de champs électriques et de conductivités dépendent de l'environnement spatial et des mécanismes physiques de l'interaction électron-matière et du transport de charges. Pour les comprendre, il est nécessaire de construire un modèle physique et numérique, représentatif de cette physique. Ceci est l'objectif du chapitre II, qui propose de synthétiser les modèles physiques utilisés dans cette thèse. Une analyse critique permet de sélectionner ceux qui sont le mieux adaptés pour décrire les évolutions des niveaux de charges des polymères sous irradiation. Ils se déclinent en deux catégories : les modèles spécifiques à l'interaction électron-matière et ceux décrivant de manière plus générique la physique du transport de charges dans les diélectriques. L'objectif étant de construire un modèle précis, mais peu coûteux en temps de calcul, des modèles analytiques ou

numériquement simple à résoudre ont été privilégiés pour construire le modèle THEMIS. Par ailleurs, le modèle THEMIS est construit pour pallier aux inconvénients de ses prédécesseurs. Il prend en compte les non-uniformités des densités de charges (liées à l'implantation non-uniforme des charges dans le matériau en particulier) et les effets du champ électrique sur l'interaction électron-matière et le transport par convection/diffusion des charges, ce qui n'est pas le cas de la plupart des modèles existants dans la littérature.

Le chapitre III a pour objectif de valider le modèle THEMIS sur deux polymères, le Téflon® FEP et le Kapton® HN, et d'analyser leurs propriétés électriques sous irradiation représentative de l'environnement géostationnaire. En effet, il est connu que le Téflon® FEP tend, sous irradiation, à devenir de moins en moins conducteur alors que le Kapton® HN de plus en plus conducteur. Pour comprendre ces comportements, leurs densités volumiques de charges et leurs niveaux de potentiels sont étudiés à l'aide d'expériences spécifiques, réalisées au sol. Ces expériences ont permis d'améliorer notre compréhension des mécanismes physiques microscopiques de l'interaction électron-matière et du transport de charges. Par comparaison expérience-numérique, les propriétés électriques des polymères sont caractérisées. Cela permet de comprendre les différences de comportement, d'un polymère à l'autre sous irradiation, et de mettre en évidence l'importance d'un modèle 1D prenant en compte le transport des charges.

Le chapitre IV étudie, sur le Kapton® HN, l'influence du champ électrique sur les phénomènes physiques de l'interaction électron-matière et du transport de charges. Cet effet a d'abord été mis en évidence expérimentalement, puis analysé à l'aide de modèles physiques existants dans la littérature. A l'aide d'une étude comparative expérience-numérique, il a été montré que le champ électrique a une influence non linéaire sur les phénomènes d'ionisation et de déplacement des charges. Cela a permis de caractériser avec plus de détails les propriétés électriques du Kapton® HN, et de pouvoir prédire avec exactitude les évolutions temporelles de ses niveaux de charges sous irradiation spatiale.

Le chapitre V répond à plusieurs objectifs, mais en particulier, au fait de pouvoir prédire les niveaux de charges (et donc les risques d'occurrences de décharges électriques) des polymères spatiaux dans des conditions réalistes, à l'aide d'un outil numérique tel que THEMIS. Ce chapitre souligne l'importance de la connaissance des propriétés matériaux et de l'influence du champ électrique sur les processus d'interaction électron-matière et du transport de charges. Quatre polymères sont étudiés et leur comportement en charge comparé, sous une irradiation représentative de l'orbite géostationnaire. Sur la base de l'écart constaté entre simulation et expérimentation, une méthodologie d'extraction des propriétés électriques applicable à un quelconque polymère est proposée. La méthodologie se base sur deux outils : d'un côté des expériences spécifiques, destinées à étudier les phénomènes physiques mis en jeu, et de l'autre,

l'outil numérique THEMIS représentatif de ces phénomènes. Par comparaisons expérience-numérique en plusieurs étapes, il est possible d'extraire les propriétés électriques de polymères. En conclusion de ce chapitre V, l'avantage d'une telle méthodologie est illustré sur le Kapton® HN. En utilisant le modèle THEMIS, les niveaux de potentiels, de champs électriques et de conductivités de ce matériau dans une configuration de charge interne sont extrapolés numériquement, avec une irradiation d'un mois, sous un environnement représentatif de l'orbite géostationnaire. Les risques d'occurrences de décharges électriques sont alors évalués pour un cas réaliste.

CHAPITRE 1. Interaction entre un satellite et son environnement : introduction à la physique de l'interaction électron-matière et du transport de charges

L'environnement spatial est un milieu agressif pour les satellites. Dans le cadre de missions scientifiques, commerciales ou militaires, des satellites sont envoyés dans l'espace. Ces derniers interagissent avec les flux de particules de l'environnement spatial qui s'accumulent dans les différents matériaux du satellite, induisent de fortes différences de potentiels électriques entre matériaux connexes, et génèrent des décharges électrostatiques. Ces décharges endommagent les composants du satellite et nuisent au bon déroulement des missions.

Le déclenchement des décharges électrostatiques est lié à d'importantes différences de potentiel entre matériaux connexes (diélectrique-métal). Ces différences de potentiel sont liées aux propriétés électriques des matériaux. Pour prédire ces risques de déclenchement, il est nécessaire d'étudier le comportement en charge des diélectriques spatiaux sous irradiation et de comprendre, d'un point de vue microscopique, les mécanismes qui gouvernent les niveaux de potentiels. Ces derniers dépendent de l'implantation des particules incidentes dans le matériau, de sa conductivité électrique et, plus particulièrement, de sa conductivité induite sous irradiation (Radiation Induced Conductivity en anglais, ou RIC [1]). La RIC caractérise l'écoulement volumique des charges stimulé par les radiations. Elle dépend de l'interaction particules chargées – matériau et de ses propriétés électriques intrinsèques.

La première partie de ce chapitre décrit les risques de l'environnement spatial sur les satellites. Dans la deuxième partie de ce chapitre, je décris l'interaction particules chargées – matériau et l'écoulement des charges dans ce dernier.

1.1 Interaction satellite – environnement spatial

1.1.1 L'environnement spatial

Dans le système solaire, le type de particules (chargées ou non), leur flux, et leur énergie dépendent de leur origine. Elles proviennent soit du rayonnement cosmique (voie lactée ou autres galaxies) soit du soleil (vent solaire). Les particules du rayonnement cosmique sont composées majoritairement de protons à 88%, de noyaux d'hélium à 9%, d'électrons et de nucléons. Les énergies de ces particules sont très élevées et s'étendent de 100 MeV à 100 GeV. Les particules du vent solaire sont principalement constituées d'électrons et de protons. Elles ont des énergies qui s'étendent de 10 keV à 10 MeV [2]. Le flux des particules en provenance du Soleil est bien plus important que celui du rayonnement cosmique. Leur influence sur les satellites est donc plus importante.

Les magnétosphères planétaires sont également des endroits où l'on peut rencontrer des particules de fortes énergies et de forts flux. Sous l'effet du champ magnétique planétaire, les particules se retrouvent piégées autour de la planète. Elles sont accélérées par le champ magnétique et diffusent au travers des lignes de champ, ce qui crée les ceintures de radiation.

- Autour de la Terre, il existe deux ceintures de radiations principales. Ce sont les ceintures de Van Allen découvertes en 1958 [3]. La première, située entre 700 km et 10 000 km au-dessus du sol, est principalement constituée de protons de haute énergie (100 MeV). La deuxième, située entre 13 000 km et 65 000 km, est principalement constituée d'électrons de quelques dizaines et centaines de keV. La Figure 1.1 est une illustration de ces ceintures.
- Concernant Jupiter, son environnement radiatif est beaucoup plus dangereux pour les satellites que celui de la Terre. Afin d'éviter des dysfonctionnements, voire la destruction des équipements, les satellites en restent éloignés. Des missions, telles que Galileo (1995-2003) ou New Horizon (2007), ont été mises en place pour étudier la dynamique de sa magnétosphère.

Pour modéliser les ceintures de radiation de la Terre et de Jupiter, des modèles, tels que le modèle Salammbô ([4], [5]), ont été développés. Leur objectif est de prévoir l'environnement radiatif que vont rencontrer les futures missions spatiales, pour prévenir les éventuelles anomalies.

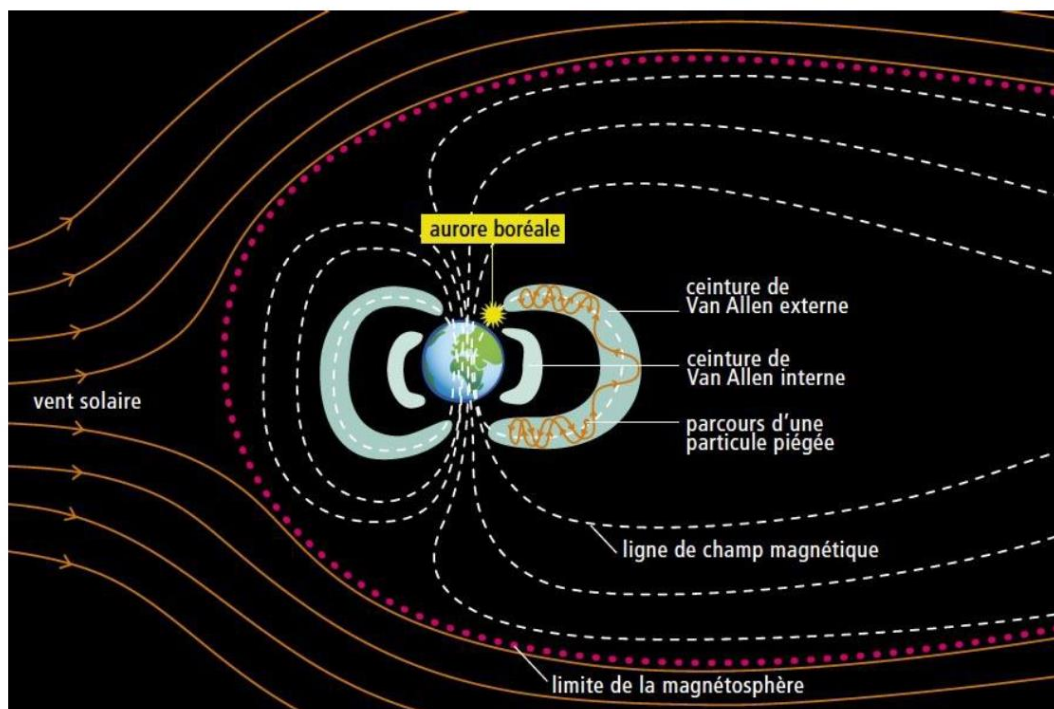


Figure 1.1 : Interaction entre le vent solaire et la magnétosphère terrestre. Illustration des ceintures de Van Allen. La ceinture intérieure est principalement constituée de protons. La ceinture extérieure est principalement constituée d'électrons. Source : [6].

1.1.2 Satellites : présentation et applications

Les satellites artificiels sont généralement composés de deux parties. Une partie est destinée à la charge utile (instruments liés à la mission du satellite) et une autre partie à assurer les fonctions de support (contrôle thermique, fourniture d'énergie – panneaux solaires, maintien de l'orientation et communications). Pour résister aux radiations, aux contraintes mécaniques et aux forts gradients de températures, des matériaux spécifiques sont utilisés. De nombreux polymères sont en particulier très utilisés en raison de leurs très bonnes propriétés thermiques et mécaniques. D'un point de vue électrique, ils sont assimilables à des diélectriques. Ils peuvent être à base de fluor (Téflon®), de polyimide (Kapton®), de silicone ou d'époxy (Epoxy FR4). Plus précisément, on les utilise pour l'isolation de connecteurs, de cartes électroniques PCB (Printed Circuit Board), pour le contrôle thermique ou la fixation de câbles électriques. A titre d'exemple, la structure du bras CANADARM2 de l'ISS (International Space Station), présentée sur la Figure 1.2, est fabriquée à base de certains de ces polymères.

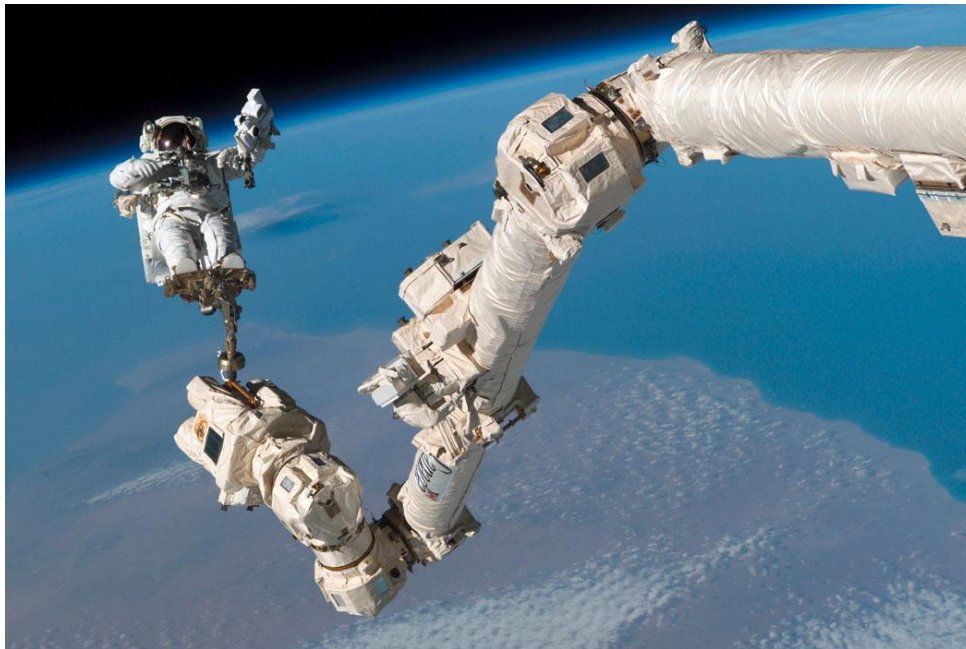


Figure 1.2 : Bras CANADARM2 utilisé à bord de la station spatiale internationale et fabriqué à base de polymères. Crédits : [7].

Les cas d'application pour les satellites sont nombreux : recherche scientifique, télécommunication, observation, navigation, cartographie, renseignements. En fonction des cas d'application, les satellites utilisés lors des différentes missions (présentées ci-dessous) interagissent avec des environnements variés. Ce peut être avec le vent solaire, les ceintures de radiation des magnétosphères de la Terre, de Jupiter, de Saturne... Au cours de ces interactions, les particules chargées de l'environnement spatial impactent et chargent les matériaux, créant des décharges qui perturbent les mesures, génère des anomalies ou endommagent les composants du satellite. La problématique de charge est détaillée dans la partie 1.1.3.1.

Recherche scientifique :

Les satellites sont utilisés pour l'étude de la physique fondamentale grâce à des systèmes de mesure et de détection embarqués. Les télescopes Hubble (1990-2020) et JWST (2020-2026) permettent de comprendre les processus de création d'étoiles ou de galaxies. Les missions Microscopes [8] ou Lisa sont destinées à étudier respectivement le principe d'équivalence et les ondes gravitationnelles.

Les satellites sont également utilisés pour étudier les corps célestes de notre système solaire. La mission Solar Orbiter (2019-2027) a pour objectif d'étudier la dynamique du soleil. Les missions JUICE (2022-2033), Juno (2011-2021) et Huygens-Cassini (1997-2017) étudient les planètes et lunes du système solaire telles que Jupiter, Europe, Ganymède, Saturne, Titan...

Excepté le passage dans les ceintures Van Allen lors du décollage, ces satellites ne sont souvent soumis qu'au vent solaire. Les particules qui le composent peuvent charger les parties internes sensibles du satellite. La charge interne est susceptible d'engendrer des décharges électriques qui peuvent endommager certains composants.

Communication, navigation, cartographie :

Autour de la Terre, les satellites sont des moyens de communication, de navigation ou de cartographie à but civil ou militaire. En fonction de l'orbite, l'application change. Il existe autour de la Terre 3 orbites principales : l'orbite basse (Low Earth Orbit – LEO), l'orbite moyenne (Middle Earth Orbit – MEO) et l'orbite géostationnaire (GEostationary Orbit – GEO) :

- L'orbite LEO est comprise entre 80 et 2000 km. Cette orbite est utilisée pour la communication, la météorologie ou l'imagerie terrestre. Les projets One Web ou Starlink prévoient de fournir un accès mondial à l'Internet grâce à des constellations de satellites. En orbite LEO, les satellites sont parfois constitués d'instruments très sensibles, dont les mesures sont perturbées par les particules chargeantes. Ces particules ont de très faibles énergies et n'induisent généralement pas des décharges électriques (excepté au niveau des cornets polaires et de l'anomalie de l'Atlantique sud). Il s'agit de la problématique de propreté électrostatique [9]. L'ISS (International Space Station), qui se situe à 400 km, est également un satellite appartenant à l'orbite LEO.
- L'orbite MEO est comprise entre 2000 km et 35786 km. C'est une orbite utilisée principalement pour les systèmes de navigation et de positionnement. Par exemple, il s'agit du GPS pour les Etats-Unis, de Galiléo pour l'Europe et de Glonass pour la Russie. Sur cette orbite, les risques de décharges sont plus importants qu'en orbite LEO car les énergies et les flux de particules sont plus grands. Les satellites sont au cœur des ceintures de radiation.
- L'orbite GEO, qui se situe à plus de 35786 km, sert aux moyens de télécommunication, navigation et positionnement. Sur cette orbite, les particules qui impactent les satellites ont des énergies et des flux importants, de plusieurs centaines de keV. Elles pénètrent en profondeur du satellite, génèrent de la charge interne et de la charge de surface, et peuvent endommager les composants principaux du satellite.

On dénombre à ce jour plus de 7200 satellites en orbite autour de la Terre. Une illustration de leur position est faite sur la figure ci-dessous.

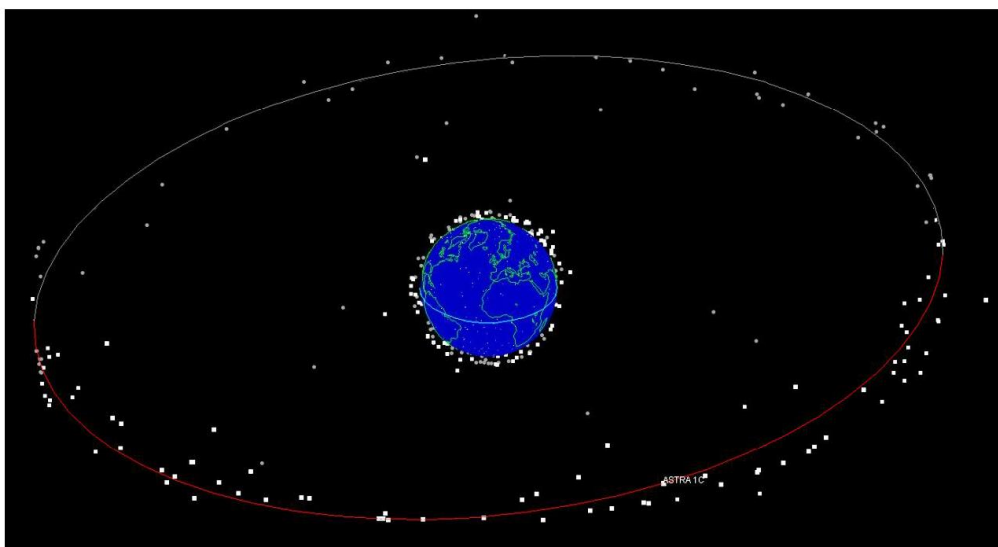


Figure 1.3 : Illustration de la position des satellites en orbite autour de la Terre. L'orbite GEO est représentée par le cercle rouge. Crédits : NASA.

1.1.3 Couplage d'un satellite avec son environnement

1.1.3.1 Charge d'un satellite

En environnement spatial, les satellites subissent les flux de particules chargées qui les impactent et les chargent. Les électrons, qui ont une masse inférieure à celle des ions, sont plus rapides. Le flux d'électrons est donc plus important que le flux d'ions et le satellite se charge négativement. Après un certain temps, un potentiel d'équilibre, que l'on appelle potentiel flottant [10], est atteint. Il correspond au point d'équilibre entre la collection et l'émission des particules chargées (photo-émission et émission secondaire électronique [11]). Des matériaux conducteurs, tels que les métaux, se chargent généralement proche du potentiel flottant. D'autres matériaux, beaucoup moins conducteurs, tels que les polymères, se chargent à des potentiels bien différents. Ces différences sont liées aux propriétés électriques des matériaux qui régissent l'écoulement des charges et leur conductivité. Lorsque la différence de potentiel entre polymères et métaux devient trop importante, une décharge électrostatique est initiée. Elle peut endommager le satellite, nuire à son bon fonctionnement, et parfois mettre fin à la mission. Pour pallier à ceci, il est important de choisir des polymères qui se chargent peu, tout en conservant leurs propriétés isolantes, mécaniques ou thermiques. Pour sélectionner un tel polymère, il faut étudier son comportement en environnement spatial. Pour mieux appréhender cette problématique, considérons l'exemple d'un satellite mis en orbite autour de la terre. Ce satellite est soumis à un environnement radiatif transitoire, constitué par des phases de forte irradiation et de faible irradiation (phase de relaxation).

En phase d'irradiation, les niveaux de potentiel sont gouvernés par l'ionisation du matériau et l'implantation des charges en volume. L'implantation d'électrons charge directement le matériau et génère un champ électrique en volume. L'ionisation génère des charges libres qui se déplacent et s'écoulent vers le métal sous l'effet du champ électrique. Il s'agit de la RIC (Radiation Induced Conductivity) et caractérise la capacité du matériau à écouler les charges sous irradiation. La RIC dépend des propriétés électriques du polymère. La Figure 1.4 présente l'évolution du potentiel de surface de deux polymères, le Téflon® FEP et le Kapton® HN, en fonction du temps d'irradiation, pour des épaisseurs identiques, sous un spectre de type géostationnaire. Les profils du potentiel de surface de ces deux polymères sont très différents avec le temps d'irradiation et la dose déposée. Le Téflon® FEP présente un comportement non monotone et devient de moins en moins conducteur avec l'irradiation. Le Kapton® HN présente un comportement plus monotone et devient de plus en plus conducteur avec l'irradiation. Le Téflon® FEP se charge plus significativement que le Kapton® HN et constitue, pour des valeurs de dose élevées, un matériau plus à risque que le Kapton® HN concernant l'initiation de décharges électriques. Notons que, sur Figure 1.4, les potentiels évoluent toujours au cours du temps, sans présenter d'état stationnaire, alors que l'irradiation est constante dans le temps. L'état stationnaire d'un diélectrique est très long à atteindre en environnement spatial : les flux de particules sont faibles et l'écoulement des charges dans le diélectrique lent, de par ses propriétés électriques.

En phase de relaxation, il n'y a plus d'ionisation et d'implantation. L'écoulement des charges dépend de la phase d'irradiation, pendant laquelle une charge d'espace a été induite et a modifié le champ électrique interne. L'écoulement est également gouverné par les propriétés électriques intrinsèques du polymère, telles que les interactions des charges avec les défauts du matériau. Cela s'appelle la DRIC (Delayed Radiation Induced Conductivity). Il s'agit de la conductivité retardée. Elle est observable sur la Figure 1.4 à partir de 25000 secondes d'irradiation. Ces résultats seront détaillés dans les chapitres 3 et 4.

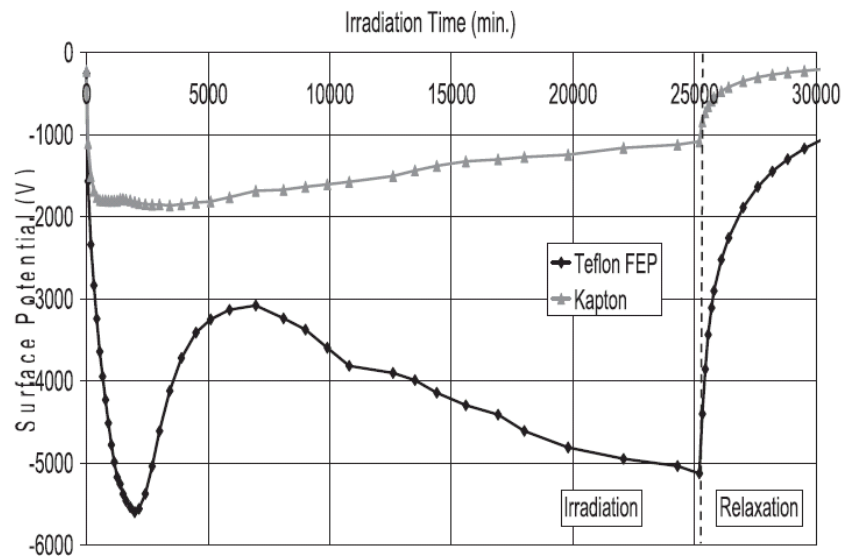


Figure 1.4 : Evolution du potentiel de surface de deux polymères différents en fonction du temps d'irradiation: Téflon® FEP (127µm) et Kapton® HN (127µm). Ces deux polymères sont irradiés par un spectre représentatif de l'environnement rencontré en orbite géostationnaire. Source : [12].

Nous venons de voir que deux matériaux, bien que tous deux de nature polymérique, présentent des comportements de conductivité et de potentiel sous irradiation et relaxation très différents. En environnement spatial, en phase d'irradiation ou de relaxation, il est important de choisir des polymères qui conduisent bien les charges pour diminuer les risques de décharges. Dans la partie suivante je décris plus en détail les différents types de décharges.

1.1.3.2 Risques de décharges électrostatiques

Sous irradiation, la charge du satellite entraîne une charge différentielle entre les différentes parties du satellite. Les différences de potentiel sont susceptibles d'engendrer des arcs électrostatiques. L'énergie libérée peut endommager les composants locaux ou créer une onde électromagnétique susceptible d'affecter d'autres composants éloignés. Dans les deux cas, ces décharges conduisent à de mauvais fonctionnements [13], voire à la destruction de certains équipements du satellite [14]. En fonction de leur intensité, durée ou des équipements touchés, la mission peut se poursuivre.

L'apparition de nouvelles technologies de propulsion destinées au transfert d'orbite, telles que l'EOR (Electric Orbit Raising [15], [16]), accentue la problématique de décharge. Usuellement, le transfert d'orbite s'effectue par des systèmes de propulsion chimiques qui permettent un transfert en GEO en quelques jours seulement. L'EOR, utilisée pour réduire la masse de carburant et augmenter la charge utile du satellite, ne permet des transferts d'orbite que sur plusieurs mois. Pour une mise à poste en orbite géostationnaire, le satellite est soumis pendant plus de temps aux conditions agressives des ceintures de radiations. En conséquence, les risques de décharges augmentent. Différents types de décharges peuvent être distingués :

- Les décharges liées à de la charge de surface : Elles concernent les matériaux de surface, tels que les panneaux solaires. Les polymères, à cause de la photo-émission et de l'émission électronique secondaire, sont chargés positivement par rapport au métal. Une décharge a lieu du métal vers le diélectrique. Cela s'appelle décharge en gradient inverse. Dans certains cas, elle n'a pas d'impact sur l'électronique du satellite, ou engendre de simples modifications électroniques, voire de fausses indications qui sont facilement réversibles. Ces changements, temporaires, ont peu de conséquences sur la mission. Il convient simplement de redémarrer l'électronique du satellite. Dans d'autres cas, la décharge peut être entretenue par la tension d'alimentation des cellules solaires. Sur le long terme, lorsque ces décharges se répètent, elles endommagent définitivement les panneaux solaires. Le satellite perd progressivement l'usage de ses cellules solaires, ce qui l'empêche de s'alimenter en énergie et de poursuivre sa mission. Pour prédire ces risques de décharges, les niveaux de potentiels surfaciques de ces matériaux sont simulés en utilisant des logiciels dédiés à l'étude de la charge de surface et de la charge interne, tels que SPIS [17] ou SCATHA 3M [18]. Une illustration est faite sur la Figure 1.5, grâce au logiciel SCATHA 3M, qui représente les niveaux de potentiels d'un satellite en orbite géostationnaire, en phase d'éclipse de soleil.

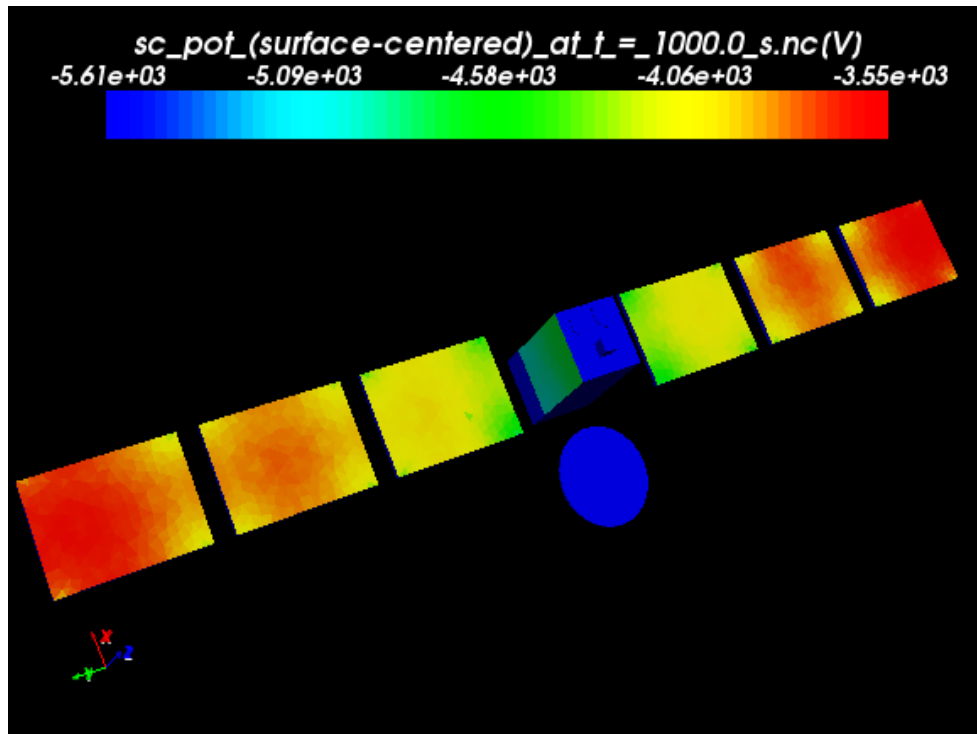


Figure 1.5 : Potentiels de surfaces des différentes structures du satellite, obtenus avec le logiciel SCATHA 3M [18]. Source : [19].

- Les décharges liées à de la charge interne : Elles concernent les polymères épais, localisés dans les parties intérieures du satellite, qui contiennent l'électronique importante du satellite [20] (Figure 1.6). Ce sont par exemple des cartes PCB (circuit imprimé) ou des câbles électriques qui supportent le transfert d'information (Figure 1.7). La charge est généralement causée par les électrons de haute énergie, pénétrant en profondeur, qui s'implantent dans les matériaux. Un champ électrique important se crée à l'intérieur du matériau. A partir d'une valeur critique de champ, la décharge se propage dans son volume. On parle de décharge en gradient normal puisque le polymère est chargé plus négativement que le métal. L'énergie délivrée peut détruire le matériau. A titre d'exemple, le champ électrique de rupture d'un échantillon de Kapton® HN de 100-200 μm est de l'ordre de $4 \times 10^8 \text{ V/m}$ [21]. Une illustration des niveaux de potentiel et des niveaux de champ électrique, du câble représenté sur la Figure 1.7, est faite avec le logiciel SPIS-IC [22] sur la Figure 1.8. Les niveaux de potentiel sont représentés en Volt (de 14V pour la valeur la plus haute à -1 320V pour la valeur la plus basse) et les niveaux de champ électrique en Volt/mètre (de 10^3 V/m à 10^7 V/m). Ce câble est soumis à l'environnement radiatif rencontré lors d'une trajectoire sub-GEO (orbite de transfert géostationnaire [23]), pour une mission de type EOR. On constate sur cette figure qu'il existe à certains endroits de fortes différences de potentiels entre matériaux connexes, proches des conditions de risque de décharges.

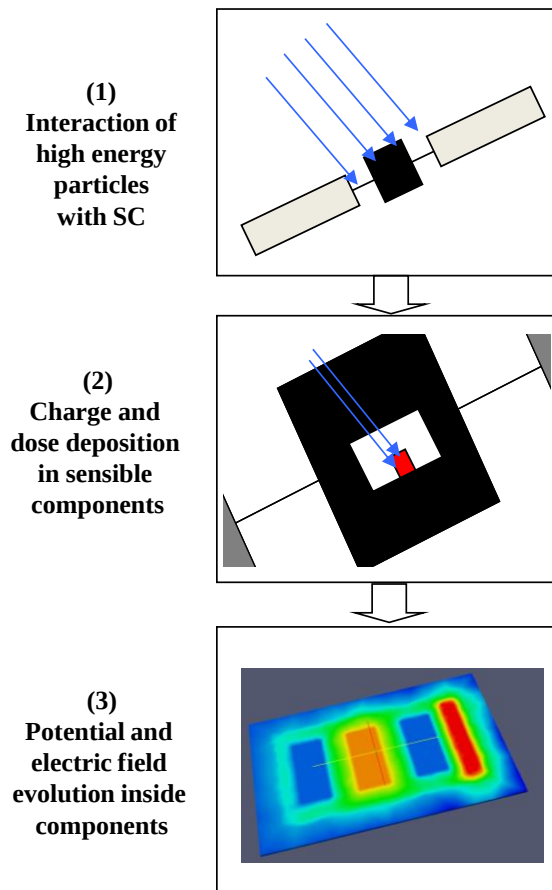


Figure 1.6 : Représentation schématique d'un cas de charge interne en utilisant le logiciel SPIS-IC [22].
Source : [23].

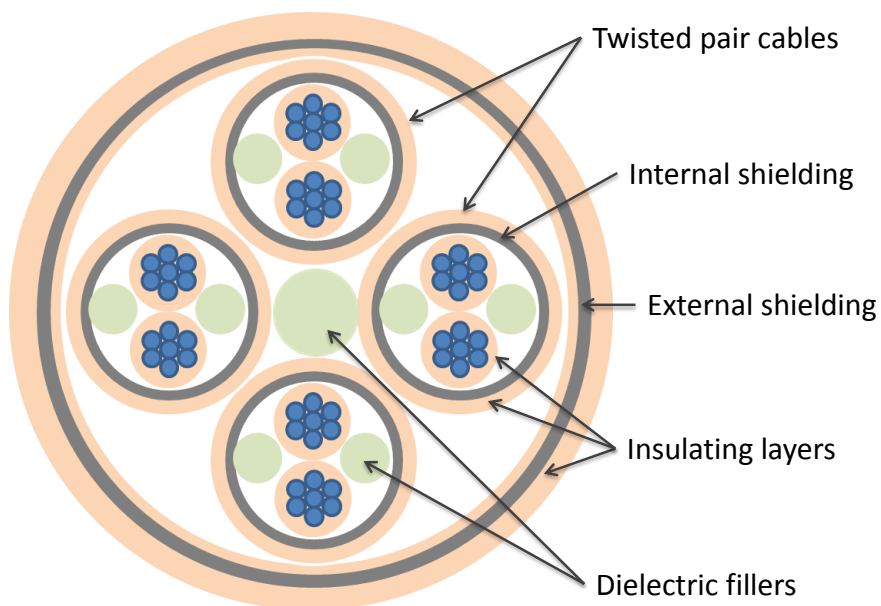


Figure 1.7 : Représentation schématique d'un câble électrique, utilisé dans le support de transfert d'information à flux rapide. Ce câble est composé de 4 câbles torsadés, chacun entouré d'une gaine de protection face aux radiations, et l'ensemble entouré d'une seconde gaine de protection. Source : [23].

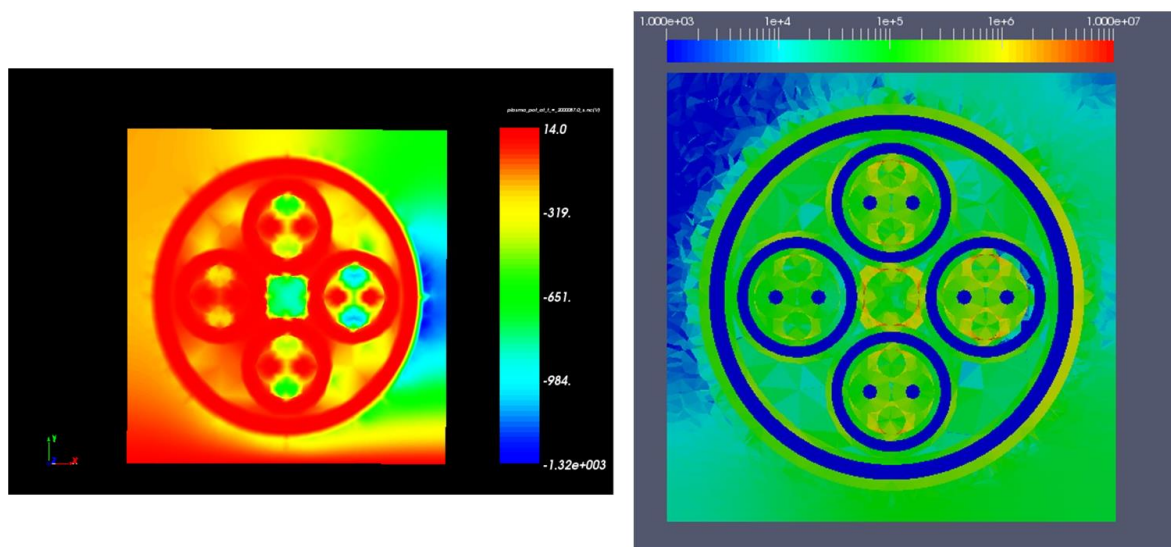


Figure 1.8 : Niveaux de potentiels et de champs électriques du câble électrique représentés sur la Figure 1.7, 23 jours après le début de l'irradiation, avec le logiciel SPIS-IC [22]. L'environnement radiatif choisi est celui d'une orbite de transfert géostationnaire, où l'apogée et le périgée du satellite sont différents, mais évoluent avec le temps, pour finalement rejoindre une orbite circulaire en orbite géostationnaire. Cette trajectoire s'appelle sub-GEO. Il s'agit d'une mission de type EOR. Source : [23].

1.1.4 Comprendre et prédire le comportement électrostatique

Nous venons de voir que les risques de décharges au sein des satellites sont fréquents, dangereux, et peuvent mener à une interruption ou un échec de mission. Une bonne maîtrise de ces risques passe par une bonne prédiction du comportement en charge des polymères sous irradiation spatiale.

Ceci nécessite de comprendre, d'un point de vue microscopique, les interactions particules chargées – polymères et les processus de transport de charges. Les interactions particules chargées – polymères concernent le dépôt d'énergie dans la matière par la particule incidente, l'ionisation du matériau, la rétrodiffusion et l'émission de particules secondaires hors du matériau. Elles sont traitées, d'un point de vue physique, dans la partie 1.2 de ce chapitre. Les modèles associés sont traités dans le chapitre 2 et leurs applications dans les chapitres 3 et 4. Lorsqu'un électron a déposé toute son énergie, il s'implante dans le polymère et le charge. L'électron implanté, qui fait partie du matériau, est sujet à des phénomènes de piégeage, de dépiégeage, de diffusion, de conduction et de recombinaison. Ces phénomènes, dépendants de la température et du champ électrique, sont importants à comprendre. En effet, ils régulent l'écoulement de l'électron, donc la conductivité du matériau et donc les niveaux de potentiels. Ils sont décrits physiquement dans la partie 1.2 de ce chapitre. Les modèles associés sont décrits dans le chapitre 2 et leurs applications dans les chapitres 3 et 4.

La compréhension de l'interaction particules chargées – matériaux et/ou du transport de charges ne se limite pas qu'à la problématique de charge, rencontrée au sein des satellites utilisés lors des différentes missions. Il existe d'autres cas d'application, dans d'autres domaines, tels que la médecine (radiographie), la microscopie électronique à balayage, le nucléaire ou la physique subatomique au CERN (Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire).

1.2 Physique de l'interaction électron-polymère et du transport de charges

Dans cette partie je décris d'abord la théorie des bandes. Son introduction servira, dans les deuxième et troisième parties, à mieux comprendre la physique de l'interaction électron-polymère et du transport de charges.

1.2.1 Théorie des bandes

La théorie des bandes est historiquement utilisée pour représenter les matériaux cristallins qui présentent un arrangement moléculaire régulier (R. Pethig [24]). Dans un tel matériau, les orbitales des états étendus (c'est-à-dire les couches extérieures de l'atome de plus faible énergie) de deux atomes voisins se recourent. De par le principe d'exclusion de Pauli, les électrons partagés ne peuvent pas avoir la même énergie et être dégénérés [24]. Pour lever cette dégénérescence, il se forme deux bandes d'énergie continues. Il s'agit de la bande de valence, appelée HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital – orbitale moléculaire occupée la plus haute), et de la bande de conduction, appelée LUMO (Lowest Occupied Molecular Orbital – orbitale moléculaire occupée la plus basse). L'écart entre le bas de la bande de conduction et le haut de la bande de valence est l'énergie de gap. Plus cette énergie est grande plus le matériau est isolant. Ces bandes sont décrites dans la Figure 1.9. Un métal possède une bande interdite nulle et un isolant possède une bande interdite proche de la dizaine d'électrons-volts. Entre les deux se situent les semi-conducteurs avec des énergies de gap de quelques électrons-volts. Pour les polymères, cette énergie dépend de sa structure. En général, elle avoisine une dizaine d'électrons-volts, ce qui les qualifie d'isolants. Par exemple, l'énergie de gap mesurée sur du Kapton® HN vaut 7 eV (Y. Ohki, N. Fuse *et al* [25]) tandis que celle du Téflon® FEP vaut 9 eV (A. Palov, H. Fujii *et al* [26]).

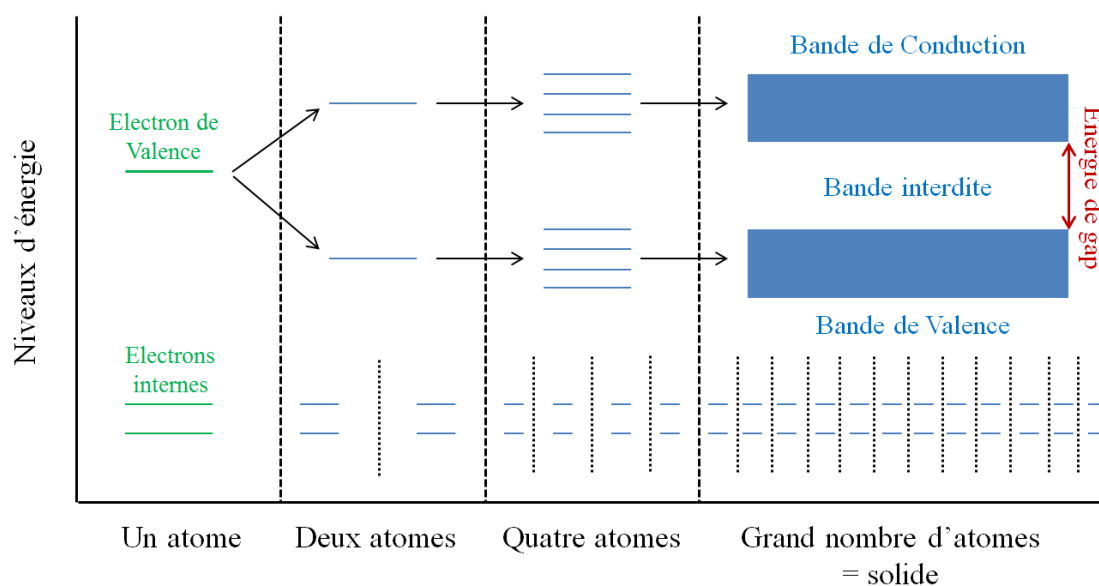


Figure 1.9 : Illustration de la théorie des bandes dans un réseau atomique régulier.

A l'état fondamental, les électrons sont situés dans la bande de valence. Lorsque tous les électrons d'un polymère sont situés dans la bande de valence, sa conductivité est nulle. Pour rejoindre la bande de conduction, les électrons ont besoin d'un apport d'énergie. Ce dernier peut être d'origine thermique, électrique ou radiatif. Sous irradiation, on parle d'ionisation lorsque l'énergie transférée au réseau par une particule incidente permet à un électron de s'extraire de son atome parent, de rejoindre la bande de conduction et de se déplacer. Plus le nombre d'électrons dans la bande de conduction augmente, plus la conductivité du polymère augmente.

1.2.2 Physique de l'interaction électron-polymère

En environnement spatial, la majorité des particules qui irradiant les matériaux sont des électrons. Les autres types de particules, tels que les protons, sont en très faible flux et ont des énergies telles, qu'ils ne pénètrent pas en profondeur dans les matériaux. C'est pourquoi, dans cette section, l'analyse de l'interaction particule-polymère se focalise sur les électrons.

A noter que, lors des irradiations menées sur terre, des rayonnements X et gammas composés d'électrons interagissent également avec le matériau. Ils proviennent de l'interaction des électrons du faisceau initial, avec les parois qui constituent l'enceinte dans laquelle l'irradiation est menée.

1.2.2.1 Dépôt de dose des électrons dans la matière et ionisation du matériau

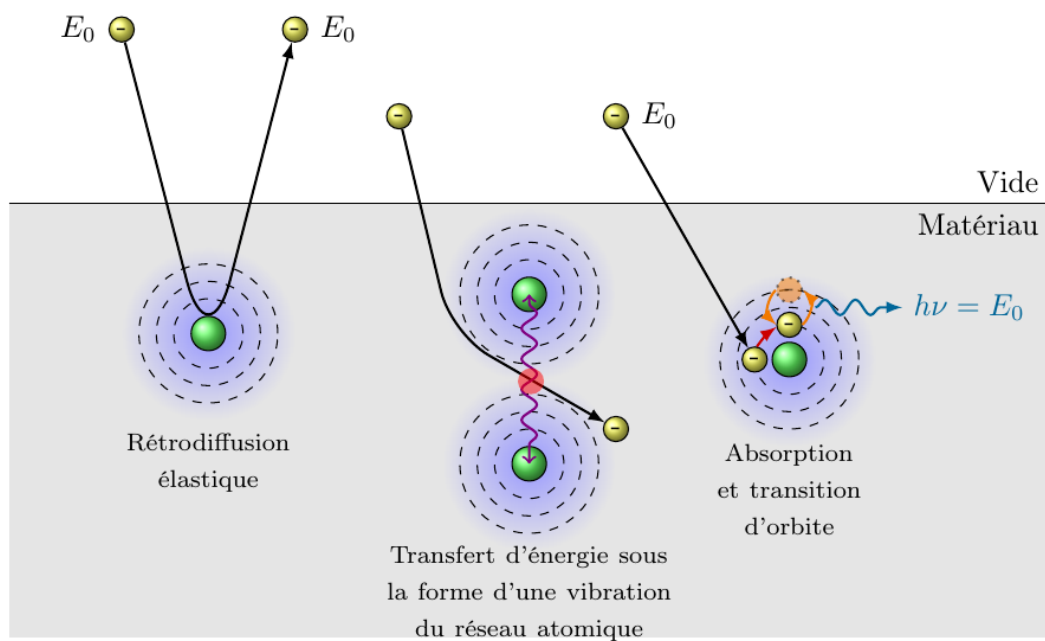
Quand un électron pénètre dans la matière, il est susceptible d'interagir avec les atomes du matériau. Cette interaction est d'autant plus probable que la densité du matériau est élevée. Lorsqu'il y a interaction, l'électron transmet une partie de son énergie au matériau et peut

ioniser la matière. Le transfert d'énergie est caractérisé par la notion de dose et de débit de dose. La dose est une grandeur qui quantifie l'énergie déposée par un électron incident (incluant les particules secondaires) rapporté par unité de masse du matériau cible. Le débit de dose est l'énergie déposée par unité de masse et par unité de temps par un flux d'électrons incident. Dans le processus d'interaction électron-polymère, il existe deux catégories d'interaction, décrites ci-dessous, qui sont les interactions non ionisantes et les interactions ionisantes. On parlera alors de dose non ionisante et de dose ionisante.

Interactions non ionisantes :

Dans ce type d'interaction, l'électron transmet de l'énergie mais n'ionise pas le matériau. Cela se produit dans trois cas :

- Premièrement, si l'interaction avec l'atome est élastique. Dans ce cas, l'électron est diffusé et change de direction sans perdre d'énergie. On parle de rétrodiffusion si la particule ressort du matériau.
- Deuxièmement, si l'interaction avec l'atome est inélastique non ionisante. L'électron change alors de direction en perdant de l'énergie. L'énergie transférée se traduit par des phénomènes de vibration du nuage électronique, appelés phonons.
- Troisièmement, si l'électron incident est absorbé par l'atome et provoque simplement le changement d'orbite d'un électron. Dans ce cas, un photon (rayon X) est généré. Son énergie, qui varie de quelques centaines d'eV à environ 1 MeV, dépend de l'énergie de l'électron incident. L'ensemble des interactions non ionisantes est représenté sur la Figure 1.10.



- : Transfert d'énergie au sein d'une orbitale atomique
- : Transition orbitale d'un électron
- ~ : Emission d'énergie par rayonnement
- ~ : Vibration du réseau atomique (phonon)
- : Transfert d'énergie par phonon

Figure 1.10 : Interactions non ionisantes entre un électron incident et la matière.

Interactions ionisantes :

Du point de vue de la théorie des bandes, une interaction ionisante se caractérise par un transfert d'énergie au réseau qui permet aux électrons de s'extraire de leur atome parent et de rejoindre la bande de conduction (Figure 1.11).

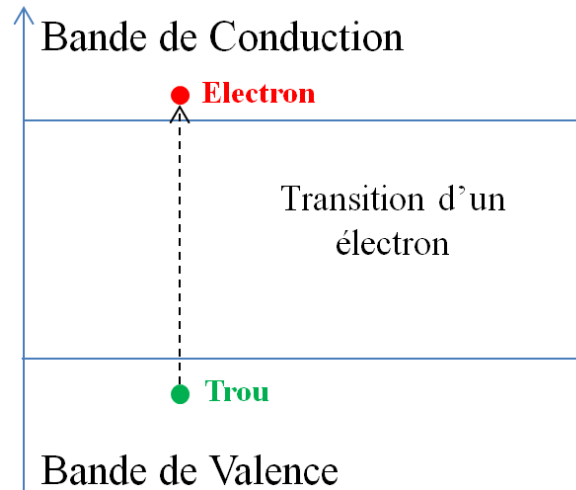
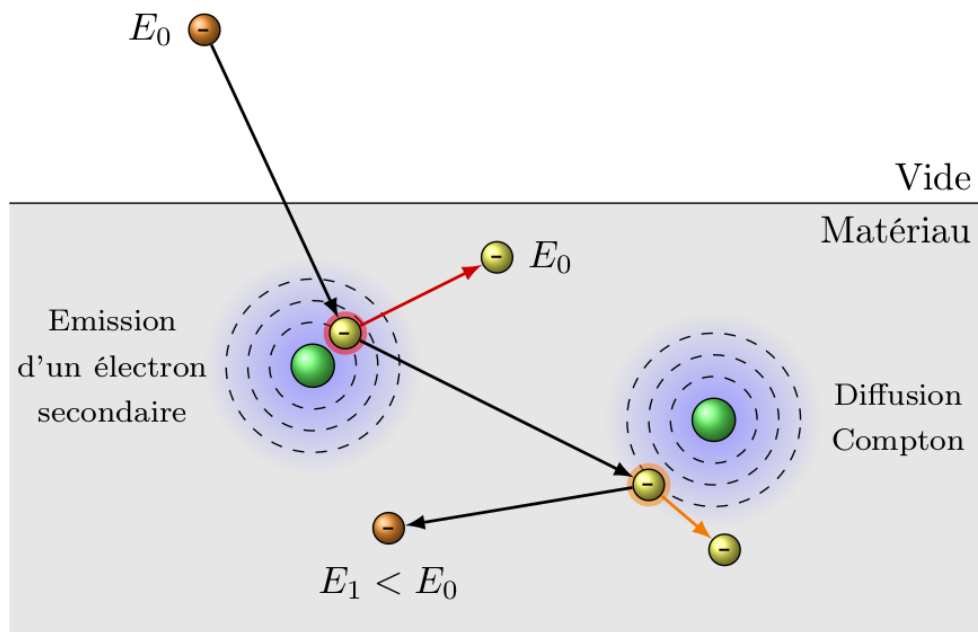


Figure 1.11 : Transition d'un électron depuis la bande de valence vers la bande de conduction sous apport d'énergie extérieure (thermique, électrique ou radiatif). Une lacune, appelée trou, est créée dans la bande de valence.

Quand un électron rejoint la bande de conduction, une lacune (charge positive) est créée dans la bande de valence. Cette charge est communément appelée trou (*hole* en anglais). L'ionisation se produit dans deux cas :

- Premièrement, lors d'une diffusion inélastique où un électron faiblement lié à l'atome est éjecté des couches extérieures après collision. Il s'agit de diffusion Compton.
- Deuxièmement, lorsque l'énergie de l'électron incident est suffisamment grande pour éjecter des électrons de cœur. On parle d'électrons secondaires. L'ensemble des interactions ionisantes est représenté sur la Figure 1.12.



- : Ejection d'un électron de coeur
- : Ejection d'un électron externe
- ⊖ : Electron incident
- ⊖ : Electrons secondaires

Figure 1.12 : Interactions ionisantes entre l'électron incident et la matière.

En 1938, L. Onsager [27] a démontré que, sous l'influence de la force coulombienne générée par le trou, il existe une certaine probabilité pour que l'ionisation complète ne s'effectue pas. L'électron, généré par ionisation, a une certaine probabilité de revenir dans son état initial et de se recombiner avec le trou. Pendant le processus d'ionisation, l'électron s'éloigne de son atome parent à une distance caractéristique appelée rayon de thermalisation [28]. L. Onsager suppose que si le champ électrique et la température qui règnent à cet endroit ne sont pas suffisamment forts, l'électron retourne dans son état initial et se recombine avec le trou laissé derrière lui. Cette recombinaison s'appelle recombinaison géminée et sera détaillée dans les chapitres 2 et 4 : elle explique en partie les effets du champ électrique et de la température sur la conductivité.

Quelle que soit l'interaction (ionisante ou non) mise en jeu, l'électron est freiné par le champ électrique du nuage électronique des atomes. D'après les équations de l'électromagnétisme développées par James Clerk Maxwell, toute particule chargée qui subit des changements de vitesse génère un rayonnement électromagnétique composé de photons : c'est l'effet Bremsstrahlung. Ce rayonnement continu de freinage produit un rayonnement X. En

l'occurrence, il s'agit de la décélération des électrons incidents. Les photons générés peuvent alors interagir avec le matériau et l'ioniser. Cela montre l'importance de modéliser toute la cascade de collision de la particule incidente en incluant les particules et rayonnements secondaires.

1.2.2.2 Implantation des électrons

Au fur et à mesure que l'électron pénètre dans le matériau, il interagit avec ce dernier en perdant graduellement de l'énergie. Lorsque l'électron n'a quasiment plus d'énergie (inférieure à quelques eV), il s'implante dans le matériau. Les particules secondaires, arrachées lors de son parcours, sont aussi implantées dans le matériau. Il est possible de représenter le parcours des électrons incidents dans la matière par des simulations Monte-Carlo, en utilisant le logiciel CASINO par exemple [29]. La Figure 1.13 illustre ce parcours pour des électrons incidents avec des énergies différentes (5 keV, 10 keV et 20 keV) qui pénètrent dans un échantillon de SiO_2 . On constate que leur parcours est erratique et ne suit pas une ligne droite. A chaque interaction, l'électron a une certaine probabilité de changer de direction, qui dépend des sections efficaces d'interaction [30]. La section efficace d'interaction caractérise la probabilité d'interaction en fonction de l'énergie de l'électron. La distance parcourue par l'électron dépend donc des sections efficaces d'interaction, de son énergie initiale et de la densité du matériau. En fonction de ces paramètres, on définit le pouvoir de pénétration des électrons. Il s'agit de la distance, projetée sur l'axe de la profondeur, qui correspond à l'arrêt de la progression des électrons incidents dans le matériau. Sur la Figure 1.13 le pouvoir de pénétration maximal des électrons de 10 keV vaut 880 nm. Celui des électrons de 20 keV vaut plus de 2640 nm. On constate que l'évolution du pouvoir de pénétration n'est pas linéaire en fonction de l'énergie. Cela est dû à la section efficace d'interaction qui n'est pas linéaire avec l'énergie.

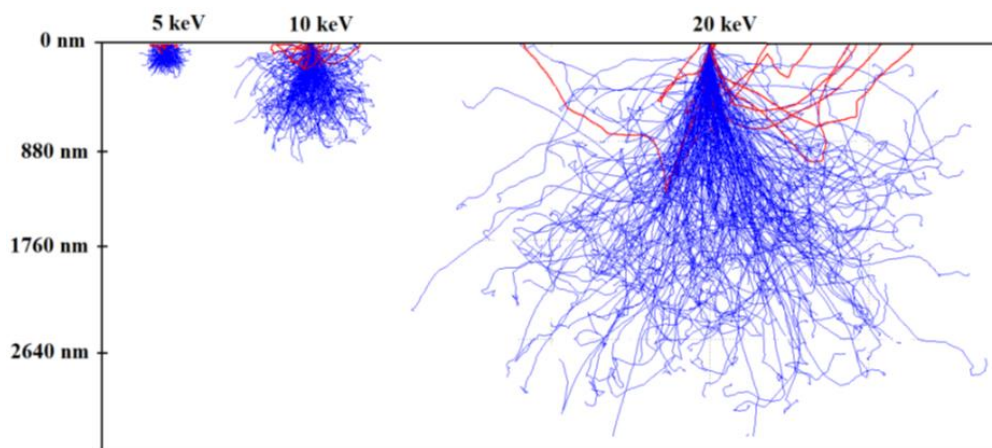


Figure 1.13 : Parcours des électrons dans du SiO_2 en fonction de son épaisseur pour 3 énergies différentes en utilisant des simulations de type Monte-Carlo avec le logiciel CASINO [29]. Les lignes rouges correspondent à des électrons rétrodiffusés qui s'échappent du matériau.

1.2.3 Ecoulement des charges

Lorsqu'un électron incident pénètre dans un matériau, il transmet son énergie jusqu'à implantation. Lors de son passage, il génère des électrons qui peuvent eux aussi s'implanter. Une fois implanté, l'électron peut s'écouler dans le matériau. Son déplacement est régulé par de nombreux phénomènes, explicables par la théorie des bandes : le piégeage, le dé-piégeage, la diffusion, la conduction et la recombinaison des charges. L'ensemble de ces mécanismes est décrit dans cette partie.

1.2.3.1 Piégeage et dé-piégeage

Afin de définir un piège, il est nécessaire de s'intéresser à la structure réelle d'un polymère et ses défauts, qui jouent fortement sur ses propriétés électriques. Lors du processus de fabrication des polymères, des atomes étrangers (impuretés), non désirés, s'insèrent dans les chaînes moléculaires. On parle de défauts chimiques (R. Hanna [31]). Des contraintes thermiques modifient également la géométrie du réseau : en fonction des zones, l'arrangement moléculaire est régulier (zones cristallines) ou chaotique (zones amorphes, Figure 1.14). On parle de défauts physiques. Les défauts chimiques et physiques introduisent, dans la bande interdite, des niveaux d'énergie discrets (Figure 1.15) qui altèrent les propriétés électriques des polymères. Ces niveaux d'énergie, ou états localisés, sont des puits de potentiel (G. M. Sessler [32], page 54) dans lesquels les charges peuvent se piéger. S'il s'agit d'un puit de potentiel faible, le piège est dit peu profond (Figure 1.15) et la charge peut se dé-piéger facilement. S'il s'agit d'un puit de potentiel fort, le piège est dit profond (Figure 1.15) et la charge reste piégée de manière plus stable.

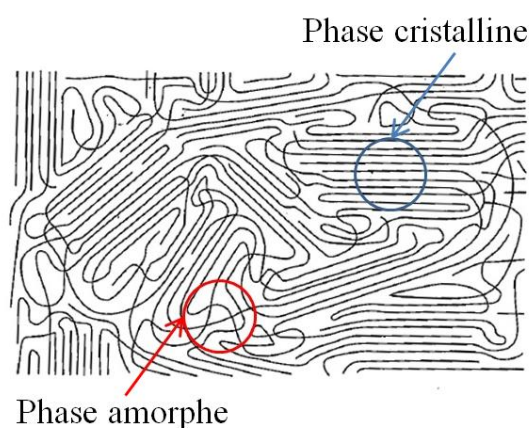


Figure 1.14 : Structure d'un polymère. Il existe des phases cristallines et des phases amorphes au sein de sa structure (T. Blythe et D. Bloor [33]).

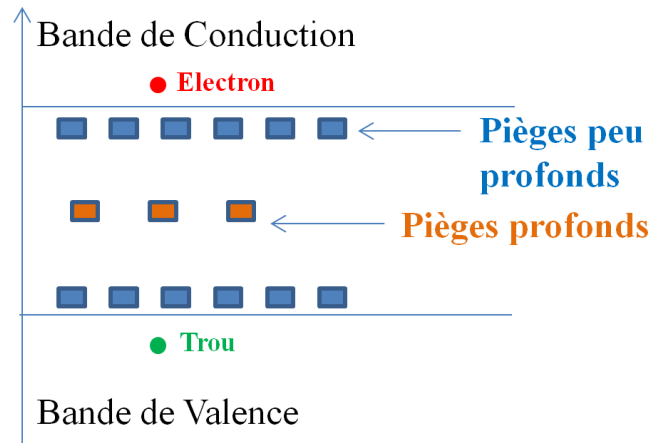


Figure 1.15 : Illustration des pièges peu profonds et profonds situés dans la bande interdite.

Pour comprendre l'influence des pièges sur l'écoulement des charges, considérons un électron piégé. En fonction de la température, du champ électrique local et de la nature du piège, l'électron a une probabilité plus ou moins forte de se dé-piéger. Pour cela, il a deux possibilités : sauter par-dessus la barrière énergétique du piège, ou passer par effet tunnel (Figure 1.16). Pour une compréhension plus détaillée, distinguons les pièges peu profonds et les pièges profonds :

- **Pièges peu profonds** : Quand les pièges sont situés près des bandes de conduction (relatif aux électrons) ou de valence (relatif aux trous), les charges sous soumises à des cinétiques de sauts entre pièges ou des cinétiques de dé-piégeage très rapides. Ces pièges sont appelés états d'Anderson [34] (ou états étendus). Ils sont énergétiquement très proches des bandes de conduction et de valence : de quelques centièmes d'électronvolt (10^{-2} eV) à quelques dixièmes d'électronvolt (10^{-1} eV). Les charges ont alors besoin de très peu d'énergie pour s'extraire du piège et atteindre soit un autre piège, soit la bande de conduction/valence. Cette énergie peut être procurée par excitation thermique ou par des champs électriques locaux peu élevés. La Figure 1.17 illustre les différents types de sauts possibles pour les électrons : inter-pièges ou hors des pièges.
- **Pièges profonds** : Quand les pièges sont isolés, loin des bandes de conduction et de valence, la probabilité de dé-piégeage est beaucoup plus faible. Un piège de haute énergie constitue un puit de potentiel d'où la charge ne peut s'extraire que sur de très longs temps caractéristiques (semaines, mois voire années). Le dé-piégeage est grandement favorisé lorsqu'il règne, localement, des champs électriques très élevés. La mobilité moyenne des charges diminue quand la

densité de pièges de haute énergie est élevée. L'extraction par effet thermique seul de ces pièges n'est pas suffisante.

Par conséquent, la conductivité d'un matériau est fortement modulée par la densité de ses pièges.

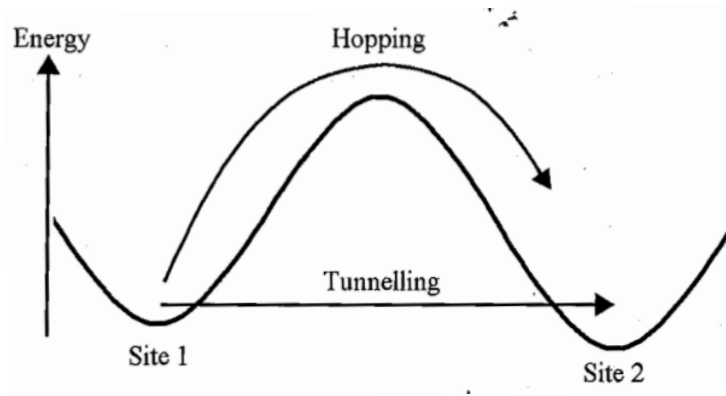


Figure 1.16 : Passage d'un électron d'un piège 1 à un piège 2 par effet tunnel ou par effet de saut, appelé *hopping* en anglais. Source : [33].

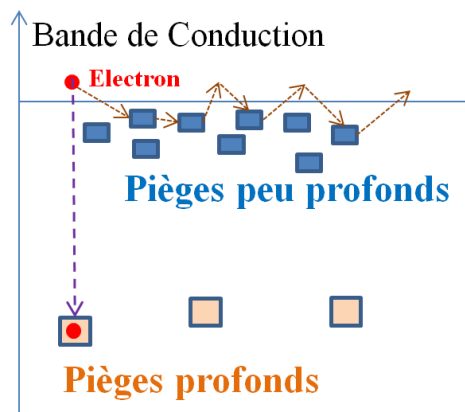


Figure 1.17 : Transfert d'électrons par sauts près de la bande de conduction. La flèche violette en pointillés symbolise un piégeage profond. L'électron reste longtemps piégé. Les petites flèches en pointillés marron symbolisent les sauts de charges d'un piège peu profond à l'autre ou des successions de piégeage/dé-piégeage entre la bande de conduction et les pièges peu profonds.

1.2.3.2 Diffusion et conduction

Le déplacement des charges dans un polymère est modulé par des effets de diffusion ou de conduction. Une illustration du processus de diffusion est faite sur la Figure 1.18. Cette Figure 1.représente un profil de densité d'électrons dans un polymère quelconque (courbe bleue). Le profil à l'état 1 est, par exemple, créé par irradiation du polymère dans lequel des électrons sont implantés. Sous l'influence des gradients de charges, ces dernières se déplacent

des plus fortes densités vers les plus faibles densités (courbe orange). En environnement spatial, il ne constitue pas le phénomène prépondérant dans le transport de charges.

L'écoulement des charges dans un polymère est principalement gouverné par des phénomènes de conduction, liés à la présence d'un champ électrique généré par ces mêmes charges. A l'état initial, c'est-à-dire avant le début de l'irradiation, il n'existe pas encore de forts champs électriques dans le polymère. Ces derniers apparaissent par implantation d'électrons. A titre d'exemple, en environnement spatial, des expériences (Figure 1.19) ont montré que le Téflon® FEP 127 μm se charge en moins d'une heure à des potentiels de l'ordre de -3000 V. Cela représente un champ électrique d'environ 2×10^7 V/m, ce qui est proche des champs de claquage pour ce type de matériau. Sous l'influence de tels champs électriques, les cinétiques de saut de charges et de dé-piégeage (présentées sur la Figure 1.17) sont fortement accélérées. Par conséquent, la conductivité du polymère augmente par effet de champ électrique. Ces phénomènes ont été démontrés en 1938 par J. Frenkel [35] en supposant que la barrière de potentiel qui sépare le piège de la bande de conduction (ou de valence), est abaissée d'un facteur $\Delta\phi$ par effet de champ électrique. Ainsi, la charge est plus facilement dé-piégée. La Figure 1.20 illustre ce mécanisme pour un piège situé non loin de la bande de conduction. Dans la littérature, ce phénomène est appelé l'effet Poole-Frenkel [36]. Cependant, cette cinétique n'est pas linéaire par rapport au champ électrique et une discussion plus approfondie en sera faite dans les chapitres 2 et 4.

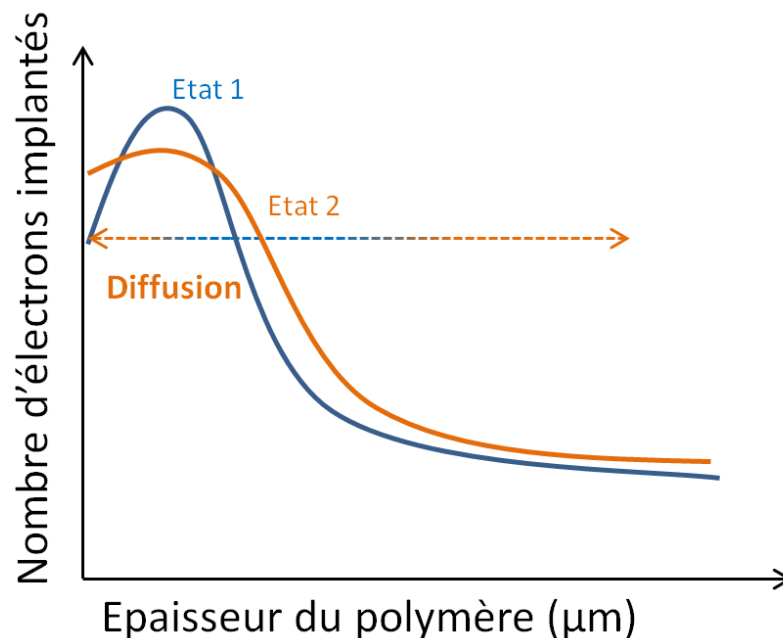


Figure 1.18 : Illustration du phénomène de diffusion. L'état 1 représente un profil quelconque d'une distribution des charges dans un polymère. L'état 2 représente une nouvelle distribution des charges dans le polymère après diffusion des charges.

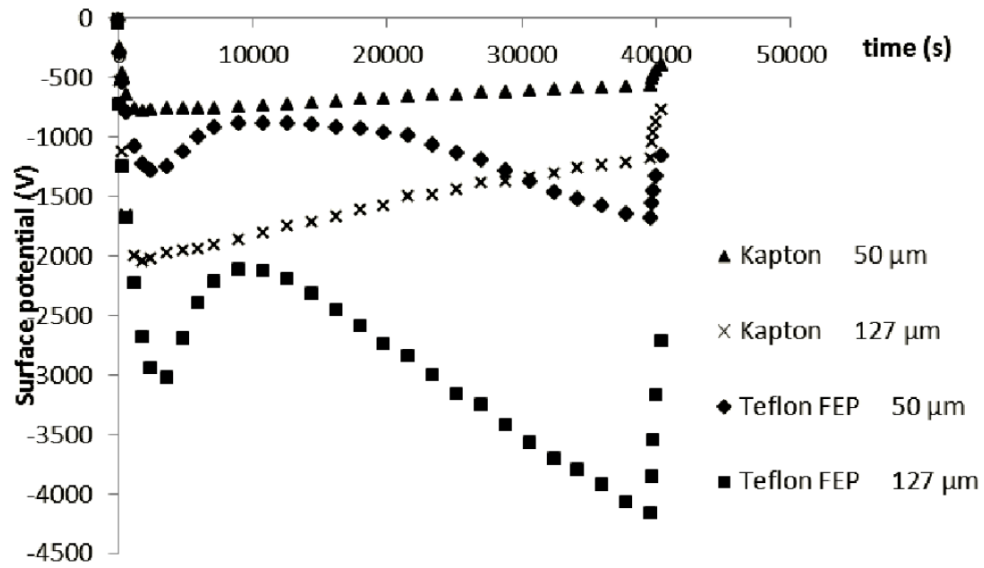


Figure 1.19 : Potentiels de surface du Téflon® FEP et du Kapton® HN pour deux épaisseurs distinctes : 50 μm et 127 μm . Source : [37].

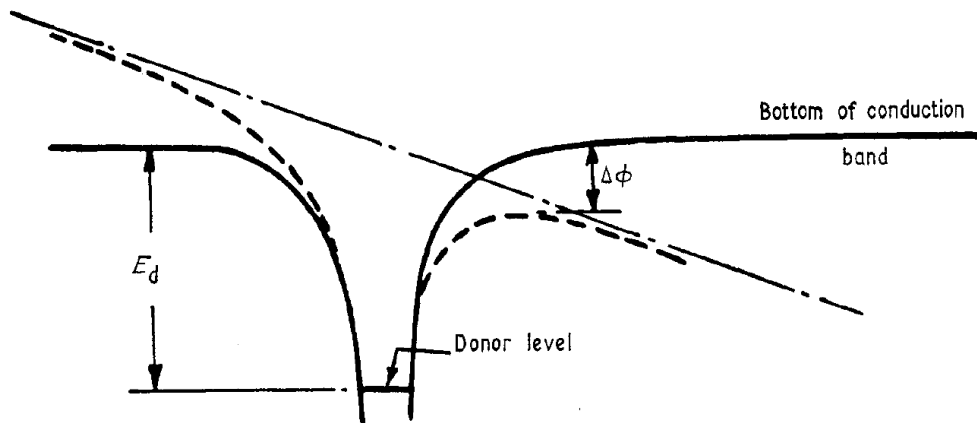


Figure 1.20 : Illustration de l'abaissement de la barrière de potentiel d'un facteur $\Delta\phi$ par effet Poole-Frenkel entre un piège et la bande de conduction. Source : J. G. Simmons [36].

Nous venons de voir que l'irradiation des matériaux conduit à des phénomènes de diffusion et de conduction des électrons et des trous. Une illustration expérimentale de ces phénomènes de transport est présentée dans l'exemple ci-dessous. Les charges, mobiles, parcourent de courtes distances et se piègent à des endroits qui diffèrent de l'endroit initial où elles ont été créées et implantées. Leurs profils de densités changent au cours du temps d'irradiation dans le matériau. Des mesures de densités de charges, dans la profondeur du matériau, ont été effectuées à l'ONERA sur un échantillon de Téflon® FEP de 127 μm . Pour effectuer ces mesures, la technique PEA (Pulsed ElectroAcoustic – [38], [39]) a été utilisée (plus amplement détaillée dans le chapitre 3). Les résultats sont présentés sur la Figure 1.21 pour 3 temps d'irradiation : 10

minutes, 20 minutes et 30 minutes. Sur cette figure, l'irradiation vient de la droite et la surface du Téflon® FEP se situe en $X=127\mu\text{m}$. Le spectre utilisé [40] reproduit les conditions environnementales rencontrées en orbite géostationnaire. Au cours du temps, on constate qu'il y a une accumulation progressive de trous en $X=100\mu\text{m}$ et une accumulation plus rapide d'électrons (en partie à cause de l'implantation des électrons) en $X=127\mu\text{m}$. Cela crée un dipôle qui renforce le champ électrique local et accélère les cinétiques de dé-piégeage des charges en provenance des pièges peu profonds. De ce fait, la conduction des charges augmente dans cette zone et les niveaux de potentiels sont modifiés. Une analyse plus détaillée de ces résultats sera faite dans le chapitre 3 grâce au modèle proposé. A la lumière de ces phénomènes, il est nécessaire d'avoir une bonne compréhension de l'interaction électron-matière et du transport de charges, pour prédire correctement les niveaux de charges des polymères sous irradiation spatiale.

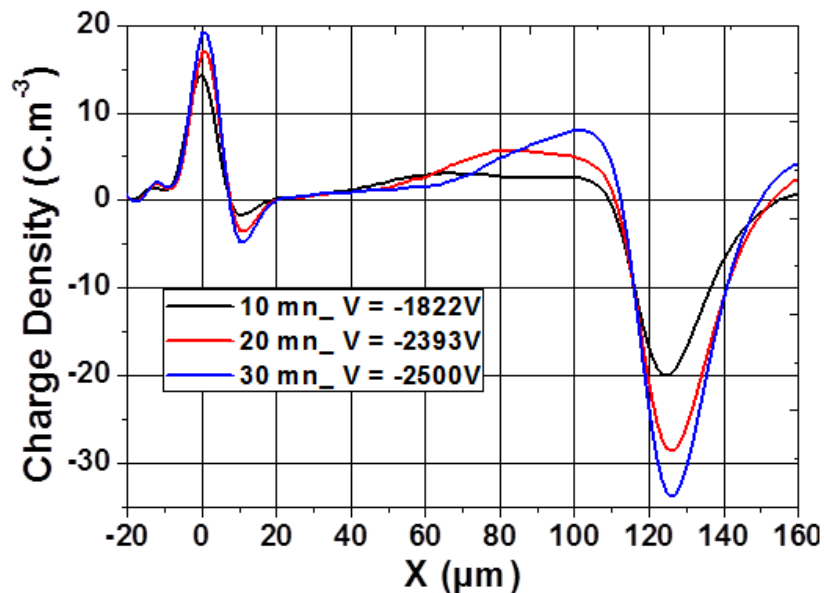


Figure 1.21 : Profils de densités de charges en fonction du temps d'irradiation dans un échantillon de Téflon® FEP de 127 μm . Sur cette figure, l'irradiation vient de la droite en $X=127\mu\text{m}$. Le spectre utilisé reproduit les conditions environnementales observées en orbite géostationnaire [40].

1.2.3.3 Recombinaison

Le transport de charges dans un polymère est aussi régulé par les phénomènes de recombinaison. Il en existe de 3 sortes : 1) La recombinaison entre un électron libre et un trou piégé, 2) la recombinaison entre un trou libre et un électron piégé et 3) la recombinaison entre un électron libre et un trou libre. La troisième signifie que l'électron libre est spontanément revenu dans son état initial en cédant son énergie sous forme de photons ou de phonon. L'ensemble de ces phénomènes est représenté sur la Figure 1.22. Plus la densité des charges est importante plus la probabilité qu'il y ait une recombinaison augmente. Le processus de recombinaison diminue

le nombre de charges libres dans un polymère et donc sa conductivité. Par ailleurs, il diminue aussi le champ électrique créé par effet dipolaire et implantation des électrons, ce qui diminue la cinétique de dé-piégeage et les courants de conduction.

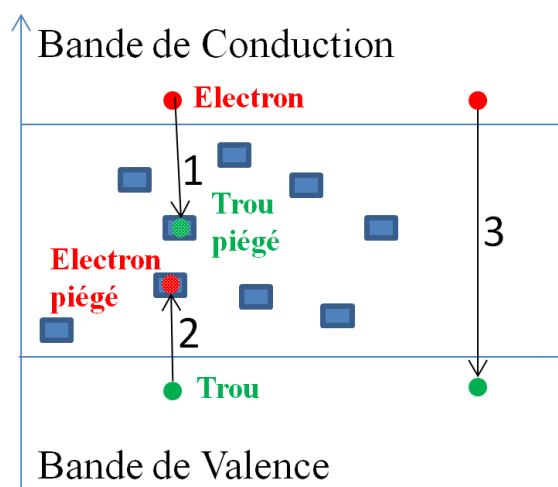


Figure 1.22 : Processus de recombinaison entre les électrons et les trous, vus par la théorie des bandes. Le numéro 1 est une recombinaison entre un électron libre et un trou piégé. Le numéro 2 est une recombinaison entre un trou libre et un électron piégé. Le numéro 3 est une recombinaison entre un électron libre et un trou libre.

1.2.3.4 Interfaces

J'ai parlé jusqu'à présent de l'écoulement des charges dans le volume du polymère. Il est également nécessaire d'expliquer leur comportement aux interfaces vide-polymère et polymère-métal car cela constituera les conditions limites du modèle proposé. En effet, en environnement spatial, les polymères sont fréquemment métallisés sur une de leur face pour permettre l'écoulement des charges à la masse.

A l'interface vide-polymère, aucune charge ne transite par diffusion ou conduction. Les seules charges qui peuvent passer du polymère au vide sont des électrons éjectés lors d'une rétrodiffusion élastique/inélastique ou par émission électronique secondaire.

La transition des charges à l'interface polymère-métal dépend de la hauteur de la barrière de potentiel qui se forme à l'interface elle-même (Figure 1.23). Cette hauteur de barrière dépend des travaux de sortie du métal et du polymère. Le travail de sortie est l'énergie minimale nécessaire pour extraire un électron du matériau dans le vide. Les polymères utilisés en environnement spatial tels que le Téflon® FEP ou le Kapton® HN présentent des travaux de sortie bien plus faibles que ceux du métal. On dit que le contact est bloquant et qu'il s'agit d'une barrière de Schottky [36]. Contrairement au contact ohmique où les charges s'écoulent librement dans les deux sens, un contact de type Schottky rend la circulation des charges

unidirectionnelle telle une diode. Pour mieux comprendre le comportement des électrons et des trous à l'interface polymère-métal considérons deux cas :

- Premièrement, lorsque **le champ électrique est négatif** (Figure 1.24). Dans cette configuration, les électrons générés par irradiation à l'interface conduisent librement dans le métal (sens opposé au champ électrique). Les trous, à l'inverse, conduisent dans le volume du polymère (dans le même sens que le champ électrique).
- Deuxièmement, lorsque **le champ électrique est positif** (Figure 1.24). Dans cette configuration, les trous générés par irradiation à l'interface se dirigent vers le métal et se recombinent, à l'interface, avec les électrons du métal. Les électrons générés à l'interface se dirigent dans le volume du polymère. A cause de la hauteur de la barrière de potentiel (contact de type Schottky), aucun électron du métal n'est injecté dans le volume du polymère.

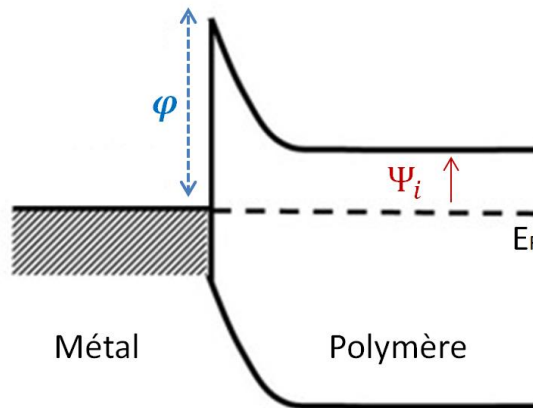


Figure 1.23 : Barrière Schottky. ϕ est le travail du sortie du métal et Ψ_i le travail de sortie du polymère [32]. E_F est l'énergie de Fermi.

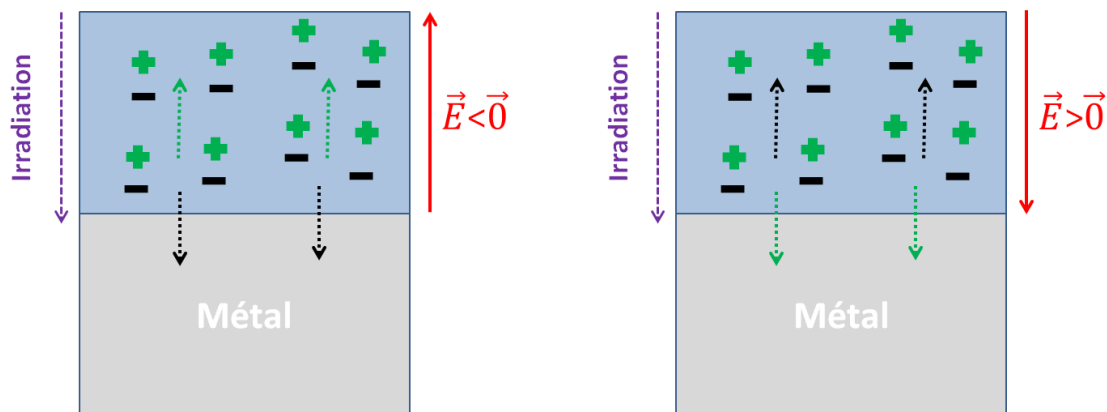


Figure 1.24 : Illustration de l'interface polymère-métal. A gauche, le cas de l'interface polymère-métal pour un champ électrique négatif. A droite, le cas de l'interface polymère-métal pour un champ électrique positif.

1.3 Conclusion

Dans ce chapitre, j'ai d'abord décrit l'interaction environnement spatial – satellites, la charge d'un satellite et les risques de décharges associés. Les décharges électrostatiques liées à la charge de surface sont très fréquentes mais le plus souvent peu dangereuses. Elles n'affectent pas l'électronique sensible. En revanche, répétées, elles peuvent détruire les panneaux solaires et couper toute source d'énergie nécessaire à la continuité de la mission. Les décharges électrostatiques liées à la charge interne sont beaucoup plus dangereuses. Elles affectent directement les instruments liés à la mission du satellite. Il suffit d'une seule décharge pour interrompre définitivement la mission.

Le déclenchement de décharges électrostatiques vient d'importantes différences de potentiel entre matériaux connexes. Pour prédire les risques de décharges, il est nécessaire de prédire les évolutions des niveaux de potentiels des matériaux sous irradiation spatiale en fonction du temps. Cela revient à analyser les propriétés électriques des polymères sous irradiation. Plus précisément, il s'agit d'étudier le comportement en charge des **polymères** sous irradiation représentative de l'environnement spatial. Pour cela, l'interaction électron-polymère et le transport de charges ont été décrits dans ce chapitre. La dose, l'ionisation, l'implantation, le piégeage, le dé-piégeage, la diffusion, la conduction et la recombinaison ont été décrits. L'ensemble de ces mécanismes régit les niveaux de conductivité et de potentiel du polymère. Ces mécanismes sont dépendants les uns des autres et certains ont de très grandes inerties (dé-piégeage des charges). Cela signifie que, malgré des irradiations constantes en fonction du temps, des états stationnaires ne sont atteints que sur de très longs temps caractéristiques : quelques mois ou années. On verra par la suite que ces phénomènes sont modélisés de différentes manières d'un auteur à l'autre.

L'objectif du chapitre 2 est d'établir une revue des différents modèles existants dans la littérature scientifique pour la description de l'interaction électron-matière et du transport de charges, et de réaliser une analyse critique de ces modèles. Ensuite, je décrirai un nouveau modèle appelé THEMIS (Transport of Holes and Electrons Model under Irradiation in Space) que j'ai développé lors de cette thèse. Ce modèle prend en compte l'ensemble des mécanismes physiques décrits dans ce chapitre. L'objectif est d'être le plus représentatif possible d'un point de vue physique pour prédire au mieux le comportement en charge des polymères sous irradiation spatiale.

CHAPITRE 2. Les modèles de l'interaction électron-matière et du transport de charges dans les polymères

Dans le chapitre 1, les risques de décharges électrostatiques entre diélectriques et métaux sur un satellite ont été décrits. J'ai présenté les mécanismes physiques qui gouvernent les niveaux de potentiels des matériaux sous irradiation : l'interaction électron-matière et le transport de charges. Dans le chapitre 2, je présente d'abord les modèles existants pour le calcul du champ électrique d'un matériau. Je présente ensuite les différents modèles associés à l'interaction électron-matière et au transport de charges dans les polymères. Une analyse critique de ces modèles sera faite en présentant leurs avantages et inconvénients. Nous verrons qu'il existe de nombreuses approches, telles que les approches probabilistes, déterministes, empiriques, en 1D, 2D ou 3D. Dans la dernière partie, je propose un nouveau modèle pour la description de l'interaction électron-matière et du transport de charges dans les polymères. Il s'agit du modèle THEMIS (Transport of Holes and Electrons Model under Irradiation in Space) développé au cours de ce travail de thèse. Il s'agit d'un modèle 1D, déterministe et semi-empirique.

2.1 Modèle de l'électrostatique : système Poisson-Ohm

Prédiction des niveaux de charges en volume :

Les équations de l'électrostatique sont utilisées pour calculer les niveaux de potentiel des polymères sous irradiation. Plus précisément, un système constitué de l'équation de Poisson [41], la loi d'Ohm et l'équation de continuité est utilisé. Par connaissance des profils de densités de charges $\rho(x, t)$ dans la profondeur du matériau, il est possible de calculer le champ électrique local :

$$\frac{\partial E(x, t)}{\partial x} = \frac{\rho(x, t)}{\varepsilon} \quad (2.1.1)$$

$$J_{vol}(x, t) = \sigma_{vol}(x, t)E(x, t) \quad (2.1.2)$$

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \nabla J_{vol}(x, t) = S(x, t) \quad (2.1.3)$$

$E(x, t)$ est le champ électrique, $\rho(x, t)$ est la densité volumique totale de charges, ε est la permittivité du polymère, $J(x, t)$ est la densité de courant des charges, $S(x, t)$ est un terme source et $\sigma(x, t)$ est la conductivité des charges. Dans certains cas, et sous certaines conditions,

il est possible de simplifier les équations (2.1.1), (2.1.2) et (2.1.3). Ces conditions se produisent en général dans le cadre de la problématique de charge de surface, et lorsque les polymères sont irradiés par des faisceaux de très basse énergie, qui implantent des charges très proches de la surface du matériau. Le barycentre du plan de charges dans le matériau est localisé, et constant dans le temps. Dans ce cas, on parle d'approximation RC_p , où le polymère est associé à un circuit RC_p : une résistance R en parallèle avec la capacité C_p du polymère. La résistance représente le courant volumique I_{vol} , constant dans le temps, et uniforme en volume. Elle est reliée au champ électrique par la loi d'Ohm : $V = RI_{vol}$. La capacité caractérise la charge du matériau. Elle est reliée au potentiel de surface V et à la charge totale Q par la relation : $C_p = Q/V$. Pour parvenir à ces approximations à partir du système d'équations précédent, on suppose que la densité des charges ρ en volume est nulle, puisque ρ est assimilé à un Dirac en surface du matériau, tel que $\rho(x, t) = \rho_{x=0}(t) \times \delta_{x=0}$:

$$\frac{\partial E(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (2.1.4)$$

Ceci permet de simplifier l'équation (2.1.1) de Poisson et d'exprimer le champ électrique en fonction du potentiel de surface V et de l'épaisseur d du matériau :

$$E(x, t) = \frac{V}{d} \quad (2.1.5)$$

De la même manière, la loi d'Ohm (2.1.2) peut être simplifiée en remplaçant le champ électrique par son expression obtenue par l'équation (2.1.5) :

$$J_{vol} = \sigma_{vol} \frac{V}{d} = \rho \mu \frac{V}{d} \quad (2.1.6)$$

μ est la mobilité des charges. Le courant volumique est alors obtenu en multipliant des deux côtés par la surface du matériau irradié :

$$I_{vol} = \frac{V}{R} \quad (2.1.7)$$

Comme les équations (2.1.1) et (2.1.2), l'équation (2.1.3) de conservation de la charge locale peut être simplifiée par intégration volumique sur l'ensemble du matériau. Le terme source $S(x, t)$ est intégré. Il dépend de la densité de courant incident J_0 , de la densité de courant de

fuite surfacique J_s et de la densité de courant d'émission secondaire J_{ES} . La divergence de la densité de courant $\nabla J_{vol}(x, t)$ est intégrée, ce qui donne $J_{vol}(x, t)$. Dans ce modèle simplifié, $J_{vol}(x, t)$ représente entièrement le courant créé par la conductivité induite sous irradiation (RIC). Pour connaître l'intégration volumique de $\partial\rho(x, t)/\partial t$, le théorème de Gauss de l'électromagnétisme est utilisé :

$$\oiint \varepsilon E(x, t) dS = \iiint \rho dV = \iiint \rho_{x=0}(t) \times \delta_{x=0} dV \quad (2.1.8)$$

La densité de charges $\rho(x, t)$, intégrée dans l'ensemble du volume, donne la densité totale de charges Q . En remplaçant $E(x, t)$ par l'expression de l'équation (2.1.5) :

$$s\varepsilon \frac{V}{d} = Q \quad (2.1.9)$$

$$s\varepsilon \frac{1}{d} \frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial t} \quad (2.1.10)$$

$$\frac{C_p}{s} \frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial t} = \iiint \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} dV \quad (2.1.11)$$

s est la surface du matériau. Finalement, en intégrant en volume les différents termes de l'équation (2.1.3), et comme le montrent R. Hanna, T. Paulmier *et al* [1], il est possible d'obtenir une équation simplifiée de la conservation du courant :

$$C_p \frac{dV}{dt} = J_0 - J_{vol} - J_{ES} - J_s \quad (2.1.12)$$

J_{vol} est la densité de courant volumique. J_{ES} et J_s sont proportionnels à J_0 via des coefficients Ψ_{ES} et Ψ_s . Ces coefficients sont respectivement le rendement d'émission d'électrons et le coefficient de courant de fuite surfacique qui constituent un biais expérimental dans les expérimentations en caisson. L'ensemble de ces courants est représenté sur la Figure 2.25.

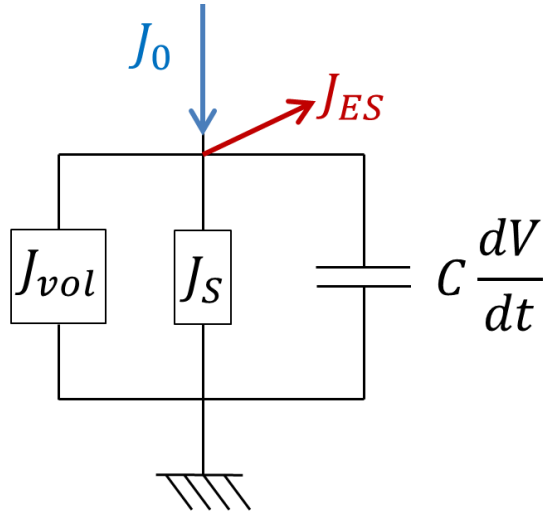


Figure 2.25 : Polymère assimilé à un circuit RC. Source : [31].

En utilisant les équations (2.1.6) et (2.1.12), on obtient l'expression de la variation temporelle du potentiel de surface :

$$\varepsilon \frac{dV}{dt} = (1 - \Psi_{ES} - \Psi_S) \times J_0 \times d - e\rho\mu_p V \quad (2.1.13)$$

Grâce à ces équations, il est possible de représenter le potentiel de surface du polymère en fonction du temps d'irradiation. La densité des charges ρ est calculée grâce au modèle de Génération-Recombinaison présenté dans la partie 2.3.2.

Conditions aux limites :

Pour étudier le comportement en charge des polymères aux interfaces, il faut d'abord définir les types d'interfaces existants. En environnement spatial, ou plus souvent lors des expériences menées sur Terre, les polymères sont fréquemment métallisés sur une de leurs faces pour établir un contact avec la masse. Cela permet d'évacuer les charges pour éviter d'avoir des niveaux de potentiels trop importants. La Figure 2.26 représente un tel cas d'irradiation. Sur cette figure, le polymère est métallisé sur sa face arrière (symbolisée par une électrode) et irradié sur sa face avant. Le potentiel de surface est noté V et le courant de sortie I_{out} .

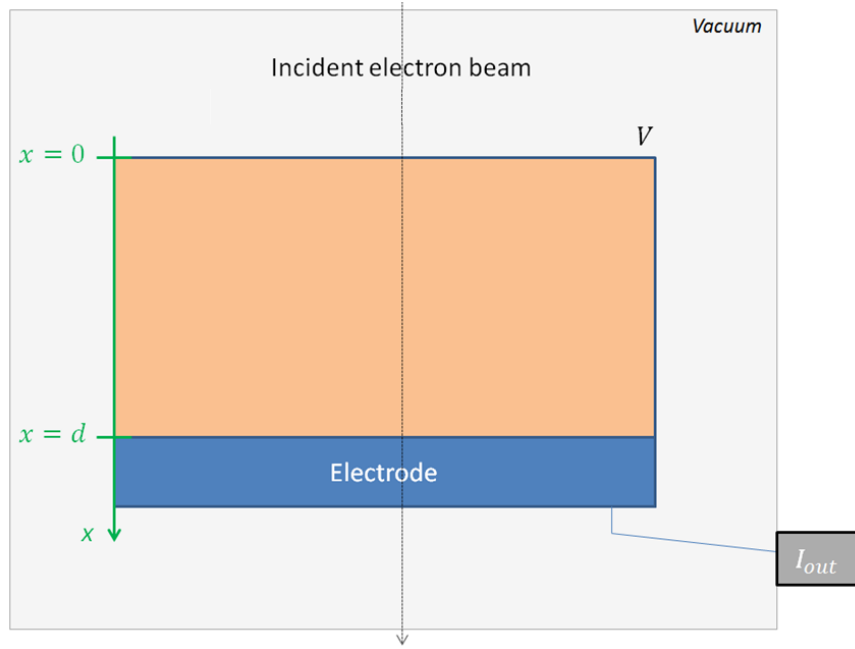


Figure 2.26 : Représentation de profil d'un polymère (orange) irradié sur sa face avant et métallisé sur sa face arrière. Son potentiel de surface est mesuré sur sa face avant et le courant de sortie sur sa face arrière.

A l'interface vide-polymère, en $x=0$, le potentiel n'est pas imposé et satisfait la condition de Robin. Cette condition traduit le comportement du champ électrique à l'interface vide-polymère grâce au théorème de Gauss. On considère qu'il n'y a pas de charges à la surface du matériau. L'équation (2.1.14) traduit cette condition (ϵ_0 est la permittivité du vide). A l'interface polymère-métal, en $x=d$, le potentiel est nul car l'électrode est mise à la masse. Il s'agit de la condition de Dirichlet, traduite par l'équation (2.1.15) :

$$\nabla V(x)|_{x=0} - \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \frac{V(x=0)}{d} = 0 \quad (2.1.14)$$

$$V(d) = 0 \quad (2.1.15)$$

La coordonnée x est substituable aux coordonnées y et z . Je viens de montrer que pour calculer les niveaux de potentiel, il est nécessaire de connaître les densités de charges. Pour connaître les densités de charges, il est nécessaire de connaître l'historique radiatif et le transport des charges dans le polymère. Les modèles de l'interaction électron-matière sont présentés dans la partie 2.2 et les modèles du transport de charges dans la partie 2.3.

2.2 Modèles de l'interaction électron-matière

Dans cette partie je présente deux méthodes pour calculer le profil d'implantation des électrons dans la matière et le profil de dose déposée, qui caractérisent l'interaction électron-matière. La première méthode est probabiliste (méthode Monte-Carlo) et la deuxième analytique semi-empirique. Pour chaque méthode, le calcul du profil d'implantation se fait de la manière suivante :

$$\frac{dj_0}{dx} = j_0 \frac{d\eta(x, W, Z)}{dx} \quad (2.2.1)$$

j_0 est la densité de courant incident et $\eta(x, W, Z)$ est la probabilité de transmission des électrons dans chaque sous-couche du matériau. A partir de $\eta(x, W, Z)$, on peut calculer la dose déposée en Gray (J.kg^{-1}) pour un électron:

$$Dose(x, W) = \frac{d[\eta(x, W, Z) \times W_r(x)]}{dx} \quad (2.2.2)$$

$W_r(x)$ est l'énergie résiduelle de l'électron.

2.2.1 Approche probabiliste : méthode Monte-Carlo

Pour décrire l'interaction électron-matière (parcours des électrons dans la matière, dose transférée, ionisation et implantation) la méthode Monte-Carlo peut être utilisée. Elle permet de décrire des situations complexes, qui mettent en jeu beaucoup de phénomènes, et pour lesquelles il n'existe pas toujours d'équations déterministes capables de les décrire. Divers outils numériques tels que GRAS (G. Santin, V. Ivanchenko *et al* [42]), FLUKA [42] ou CASINO (H. Demers, N. Poirier-Demers *et al* [43]) utilisent cette méthode. Elle n'est pas restreinte à l'étude de l'interaction électron-matière dans les polymères sous irradiation, puisqu'elle s'utilise aussi dans d'autres domaines tels que la finance ou la recherche médicale (S. Morato, R. Miro *et al* [44]).

Le principe fondamental de cette méthode est basé sur la simulation d'un nombre important d'évènements. Par exemple, dans le cadre de l'interaction électron-matière, un évènement correspond à un électron qui interagit avec un matériau. Cet électron est susceptible d'interagir avec le matériau par divers phénomènes tels que les interactions élastiques (rétrodiffusion) ou inélastiques (diffusion Compton). La probabilité d'interaction P , aussi appelée *fréquence de collision* (M. A. Lieberman et A. J. Lichtenberg [30]), de cet électron avec le matériau dépend de son énergie incidente, de son angle d'incidence ou encore de la densité du matériau. La probabilité d'interaction P de chaque phénomène physique est calculée en utilisant leur section

efficace d'interaction σ [30]. Par exemple, à l'effet Compton est associée une section efficace et à la rétrodiffusion en est associée une autre (J. C. Butcher et H. Messel [45]). P est ensuite comparée à une fonction aléatoire F . Si F est inférieure à P alors l'interaction pour le phénomène physique considéré a lieu. Ensuite, l'algorithme considère l'interaction suivante dans le cas où l'électron n'a pas encore été absorbé par le matériau et possède toujours de l'énergie cinétique. Dans le cas où l'électron est absorbé, on simule un autre événement (donc un autre électron incident). La Figure 2.27 en est une représentation fonctionnelle. Les différentes étapes de l'interaction électron-matière sont représentées.

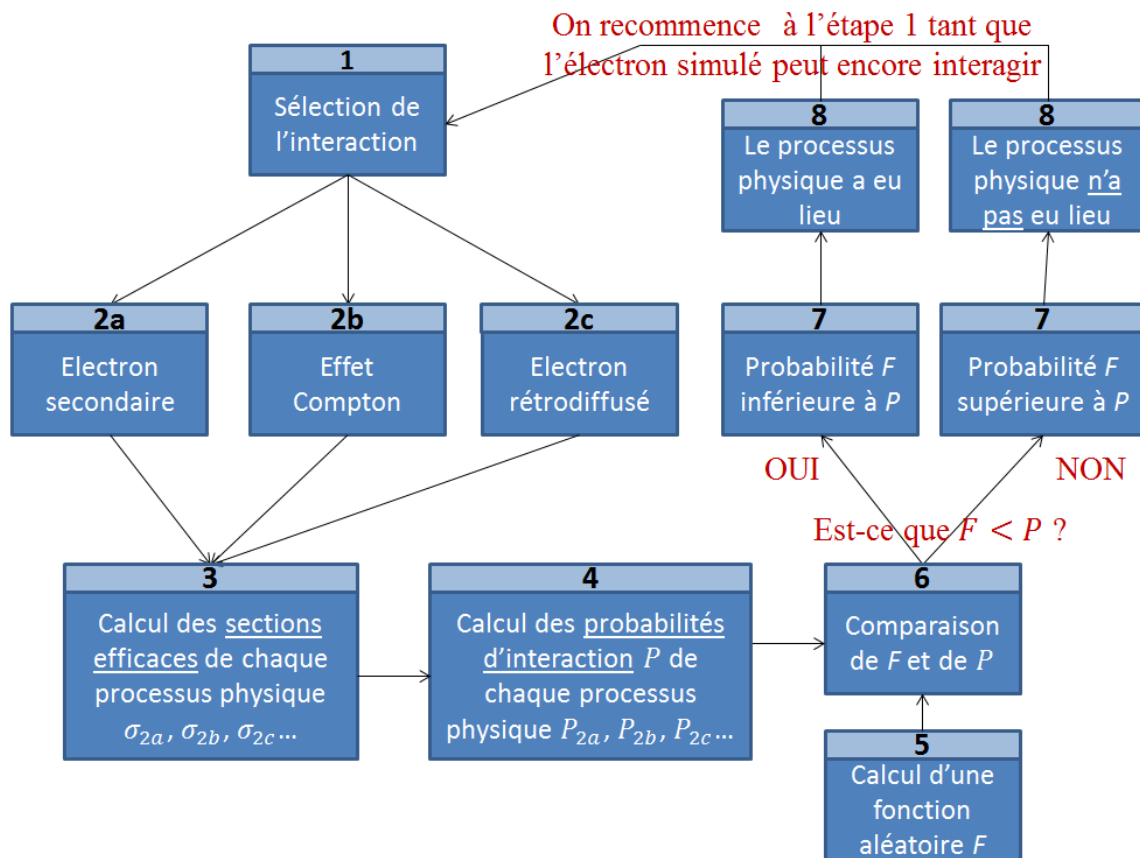


Figure 2.27 : Représentation fonctionnelle simplifiée de l'algorithme Monte-Carlo pour un électron.

La méthode Monte-Carlo est bien adaptée à la physique de l'interaction électron-matière. En effet, le nombre de phénomènes physiques mis en jeu est très important. Grâce à cette méthode, le parcours des électrons dans la matière et leur dose déposée peuvent être calculés. Une illustration du parcours des électrons en 2D et en 3D, obtenu avec le logiciel CASINO [43], est affichée sur la Figure 2.28 et la Figure 2.29. La précision de cette méthode dépend du nombre d'électrons incidents simulés. Plus ce nombre est grand, plus le bruit statistique est faible et plus la méthode est précise. En revanche, cela génère un temps de calcul considérable, en particulier quand le problème est modélisé en 3D. Il s'agit du principal défaut de cette méthode.

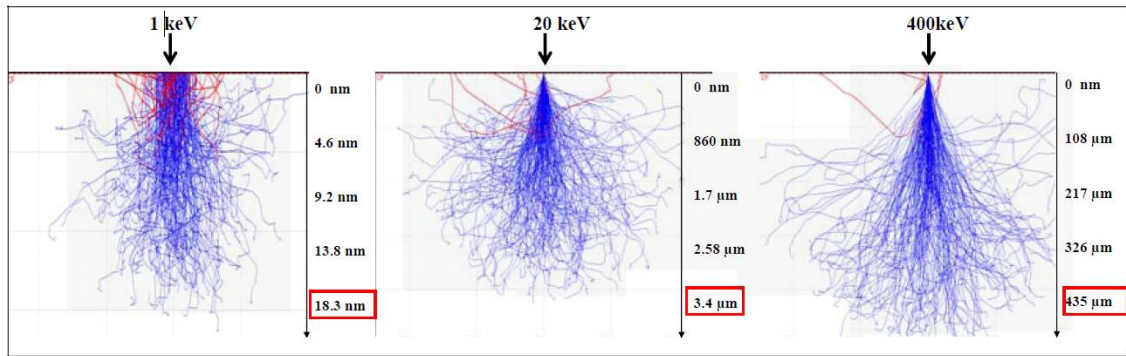


Figure 2.28 : Simulation Monte-Carlo 2D obtenue avec le logiciel CASINO de la trajectoire d'électrons d'énergies différentes (1 keV, 20 keV et 400 keV) dans du Téflon® FEP en fonction de son épaisseur. Les trajectoires rouges correspondent à des électrons rétrodiffusés qui s'échappent du matériau. Source : [31]

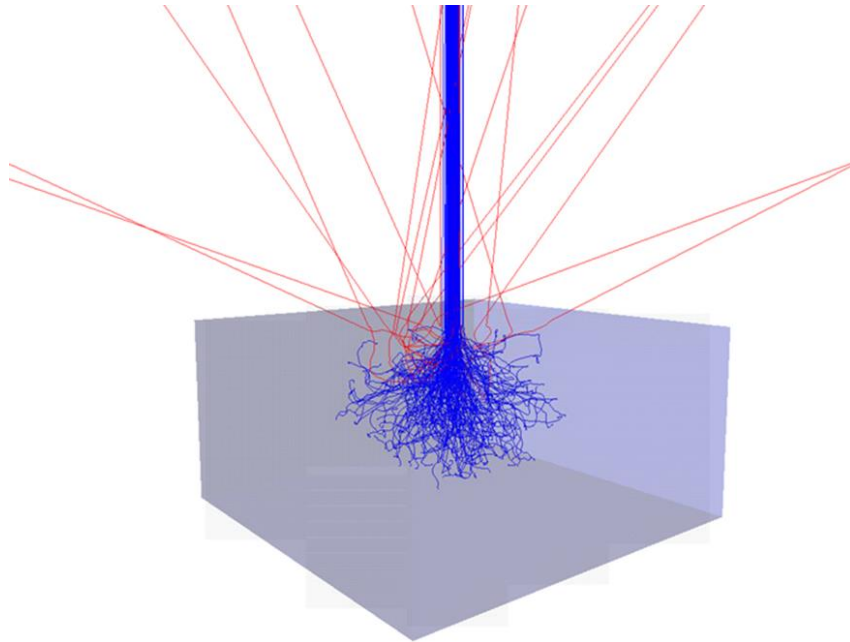


Figure 2.29 : Illustration d'une simulation Monte-Carlo 3D obtenue avec le logiciel CASINO de la trajectoire d'électrons mono-énergétiques. Les trajectoires rouges correspondent à des électrons rétrodiffusés qui s'échappent du matériau.

Grâce à la méthode Monte-Carlo, il est possible de calculer les profils d'implantation des électrons et leur dose déposée, présentés par les équations (2.2.1) et (2.2.2).

2.2.2 Approche semi-empirique

Quand un électron interagit avec un matériau, il transmet son énergie à ce dernier. Si le matériau est suffisamment épais ou si l'électron possède peu d'énergie, il est absorbé par le matériau. La distance parcourue après absorption correspond au pouvoir de pénétration des électrons dans la matière. Il existe deux définitions de cette distance. Certains auteurs comme K.

H. Weber [46], E. J. Kobetich et R. Katz [47] ou W. de Lima et C. R. Poli [48] considèrent un pouvoir de pénétration *extrapolé*, tandis que d'autres auteurs comme L. Katz et A. S. Penfold [49], considèrent un pouvoir de pénétration *maximal*. Le pouvoir de pénétration extrapolé se détermine par extrapolation du profil de dose, lorsque sa variation est maximale. Le pouvoir de pénétration maximal correspond à la distance où la valeur de la dose déposée est nulle.

La formule du parcours extrapolé, qui a été obtenue par interpolation de données expérimentales, est définie par l'équation (2.2.2.1) [46]–[48] :

$$R_{ex}(W, Z) = AW \times \left(1 - \frac{B}{1 + C \times W}\right) \quad (2.2.2.1)$$

R_{ex} est le parcours extrapolé en kg/m², W est l'énergie incidente en keV et A , B et C sont 3 paramètres obtenus empiriquement. Ils ont comme unités : kg.keV/m², *sans unité* et keV⁻¹. Ils dépendent tous les 3 du numéro atomique moyen Z du matériau. Par exemple, pour une molécule quelconque $X_a Y_b Z_c$, si Z_a , Z_b et Z_c sont les numéros atomiques de chaque composant de la molécule, alors le numéro atomique moyen est [50]:

$$Z = \sqrt[2,94]{f_a \times Z_a^{2,94} + f_b \times Z_b^{2,94} + f_c \times Z_c^{2,94}} \quad (2.2.2.2)$$

f_a , f_b et f_c sont les fractions d'électrons associées à chaque élément. Les expressions de A , B et C varient légèrement d'un auteur à l'autre. E. J. Kobetich et R. Katz [47] proposent les expressions suivantes :

$$A = (0.81 \times Z^{-0.38} + 0.18) \times 10^{-3} \quad (2.2.2.3)$$

$$B = 0.21 \times Z^{-0.055} + 0.78 \quad (2.2.2.4)$$

$$C = (1.1 \times Z^{0.29} + 0.21) \times 10^{-3} \quad (2.2.2.5)$$

Ces expressions sont valables pour des énergies variant de 20 keV à 20 MeV. W. de Lima et C. R. Poli [48] proposent des expressions de A , B et C très proches de E. J. Kobetich et R. Katz [47]. Elles sont valables pour une gamme d'énergie bien plus large (entre 0.3 keV et 10 MeV) et pour des matériaux légers (Z de quelques dizaines au maximum) tels que les polymères utilisés en environnement spatial. Pour ces raisons, elles seront utilisées dans la suite. Les expressions de A , B et C sont les suivantes :

$$A = \left(\frac{Z^{0.68}}{Z + 1.8} \right) 1.41 \times 10^{-3} \quad (2.2.2.6)$$

$$B = 0.985 \quad (2.2.2.7)$$

$$C = 0.0031 \quad (2.2.2.8)$$

L. Katz et A. S. Penfold [49] ont proposé une formule du parcours maximal notée R_{max} . La gamme d'énergie est plus restrictive que la formule de R_{ex} proposée par W. de Lima et C. R. Poli [48]. Il est préférable de travailler avec la formule du parcours extrapolé.

Le calcul du parcours extrapolé permet de calculer la probabilité de transmission des électrons à travers la matière dans chaque sous couche dx du matériau. Comme pour le pouvoir de pénétration, il existe plusieurs formules empiriques pour calculer la probabilité de transmission des électrons. E. J. Kobetich et R. Katz [47] proposent la formule suivante :

$$\eta(x, W, Z) = e^{-\left(\frac{ax}{R_{ex}(W, Z)}\right)^b} \quad (2.2.2.9)$$

$\eta(x, W, Z)$ est la probabilité de transmission des électrons (sans dimension). Elle s'exprime en fonction de l'épaisseur du matériau x en mètre, de l'énergie des électrons incidents W en keV et du numéro atomique moyen du matériau Z . a et b sont deux paramètres sans dimension obtenus par comparaison avec des simulations Monte-Carlo en utilisant le logiciel CASINO. B. N. Subba Rao [51] a proposé une autre formule de la probabilité de transmission :

$$\eta(x, W, Z) = \frac{1 + e^{-ll_0}}{1 + e^{\frac{lx}{R_{ex}(W, Z)} - ll_0}} \quad (2.2.2.10)$$

Les expressions de n et n_0 sont les suivantes :

$$l = 9.2 \times Z^{-0.2} + 16 \times Z^{-2.2} \quad (2.2.2.11)$$

$$l_0 = 0.63 \times \frac{Z}{A_m} + 0.27 \quad (2.2.2.12)$$

A_m est le nombre de masse moyen du matériau. T. Tabata et R. Ito [52] ont comparé ces formules et ont déduit qu'il n'y avait quasiment pas de différences pour des gammes d'énergie

de quelques keV à quelques dizaines de MeV et pour des numéros atomiques moyens allant de $Z = 4$ à $Z = 82$. L'équation (2.2.2.9) est plus simple que l'équation (2.2.2.10). C'est donc l'équation (2.2.2.9) qui sera utilisée.

En utilisant les équations précédentes, il est possible de calculer de manière analytique le profil d'implantation des électrons et la dose déposée, présentées par les équations (2.2.1) et (2.2.2). Pour la méthode déterministe semi-empirique, l'énergie résiduelle se calcule grâce à la formule du parcours extrapolé $R_{ex}(W, Z)$:

$$Dose(x, W) = \frac{d[\eta(x, W, Z) \times W_r(R_{ex}(W, Z) - x)]}{dx} \quad (2.2.2.13)$$

Remarque : Contrairement à la méthode Monte-Carlo, il n'y a pas de dose déposée pour des profondeurs x supérieures à R_{ex} avec la méthode déterministe semi-empirique (équation 2.2.2.13)). En effet, cela correspond à une énergie résiduelle négative. Physiquement, cela n'est pas vrai puisque le parcours des électrons est probabiliste. Ces derniers ne s'arrêtent pas strictement au niveau de R_{ex} et peuvent le dépasser. Cette légère erreur vient du fait que la formule du parcours extrapolé a été interpolée pour de grandes énergies. De ce fait, elle est moins précise pour des faibles énergies. Cette erreur est présentée sur la Figure 2.30 qui illustre le profil d'implantation et la dose déposée dans du Téflon® FEP en fonction de l'épaisseur du matériau pour un faisceau mono-énergétique d'énergie 400 keV. Sur cette figure, l'implantation est représentée par des traits continus et la dose par des traits discontinus. La méthode Monte-Carlo est représentée en rouge et la méthode déterministe semi-empirique en bleu. Dans le cas déterministe semi-empirique, on constate qu'il existe des électrons implantés après le parcours extrapolé, alors que la dose est nulle. Ce n'est pas le cas pour la méthode Monte-Carlo qui ne présente pas une telle discontinuité.

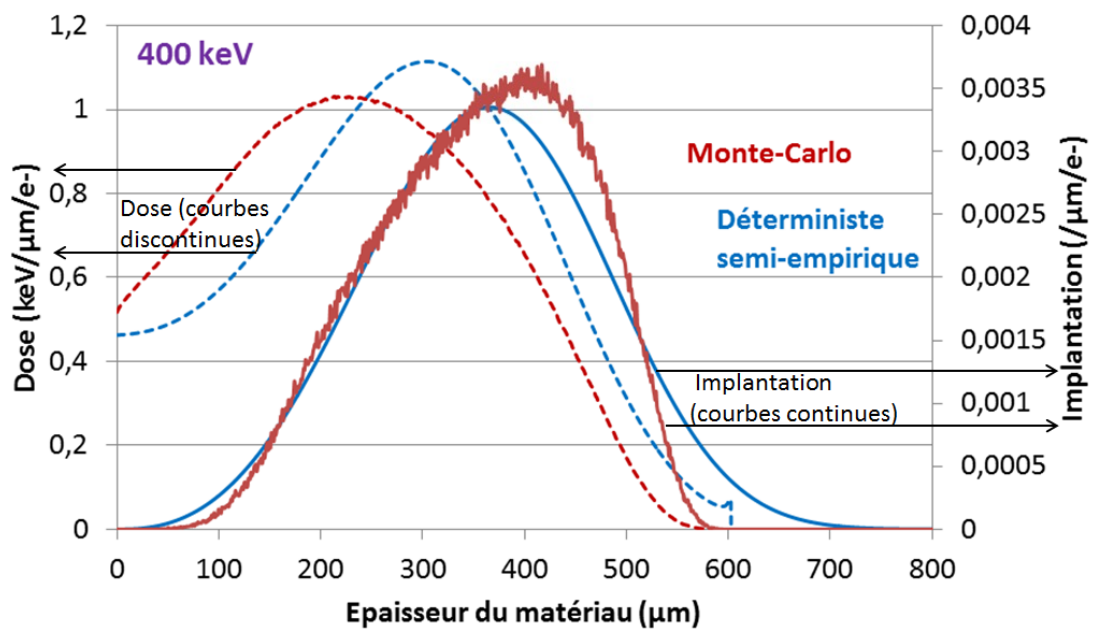


Figure 2.30 : Profils d'implantation et de dose déposée dans du Téflon® FEP en fonction de l'épaisseur du matériau (μm), pour un faisceau mono-énergétique d'énergie 400 keV. Les profils d'implantation (traits continus) et de dose déposée (traits discontinus) sont présentés pour la méthode Monte-Carlo (rouge) et la méthode déterministe semi-empirique (bleue).

Comme nous le verrons dans la partie 2.2.3, cette erreur n'est pas significative. En effet, pour un matériau et un spectre en énergies donnés, il est possible d'obtenir quasiment le même profil de dose déposée entre la méthode Monte-Carlo et les équations déterministes semi-empiriques.

2.2.3 Comparaison de la méthode Monte-Carlo aux équations déterministes semi-empiriques

J'ai montré qu'il existe deux approches possibles pour calculer le parcours des électrons dans la matière et la dose déposée. La première approche (partie 2.2.1) est probabiliste et fait appel à la méthode Monte-Carlo. La deuxième approche (partie 2.2.2) est déterministe semi-empirique. Les équations déterministes semi-empiriques présentent un temps de calcul bien plus faible que la méthode Monte-Carlo : elles sont donc plus avantageuses. Pour les utiliser, il faut connaître les paramètres de ces équations. Ces paramètres sont ajustés, pour un cas d'irradiation représentatif des conditions spatiales, de manière à faire coïncider les résultats des deux méthodes.

Pour cela, un cas d'irradiation de type multi-énergétique et proche des conditions réelles observées en orbite géostationnaire a été traité. J'ai utilisé un spectre d'électrons distribué en énergies représentatif de ces conditions. J'ai comparé le profil de dose déposée d'un matériau usuellement utilisé en environnement spatial (ici un échantillon de Cirlex® de 1 mm), en utilisant la méthode Monte-Carlo et les équations déterministes semi-empiriques. La dose a été

intégrée sur une durée de 10 heures. Cela correspond au temps maximal d’irradiation possible dans l’enceinte prévue à cet effet à l’ONERA. J’ai ajusté manuellement les paramètres a et b de l’équation (2.2.2.9) et les résultats sont affichés sur la Figure 2.31 : Profil de dose déposé dans un échantillon de Cirlex® de 1 mm. Les conditions de type géostationnaire ont été reproduites. La simulation a permis de reproduire une irradiation d’une durée de 10 heures. Figure 2.31.

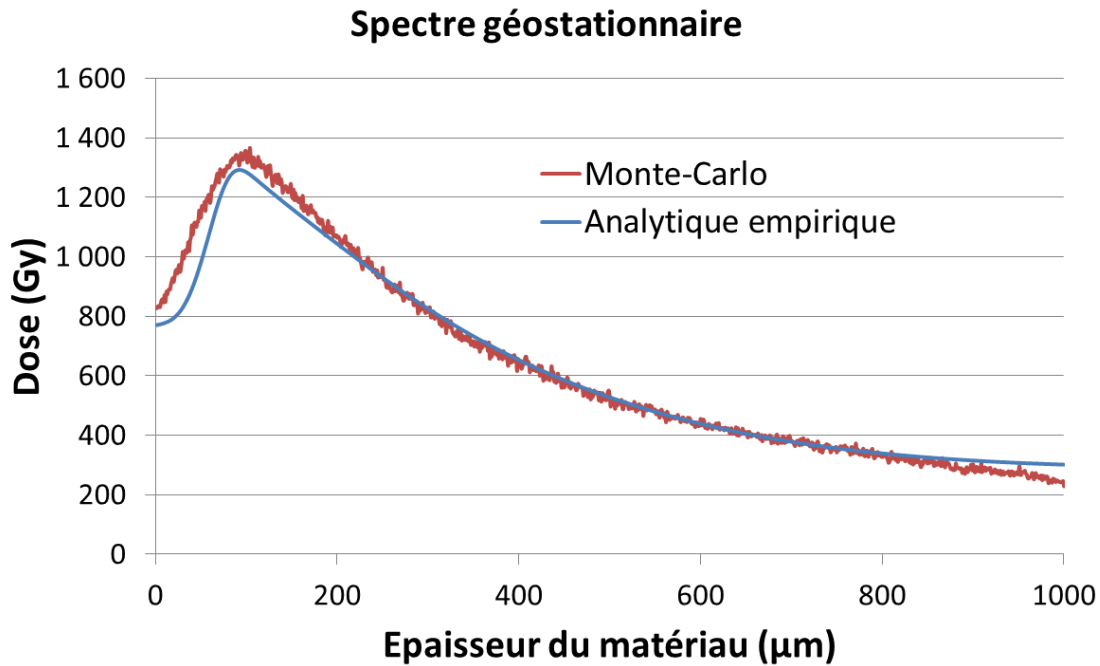


Figure 2.31 : Profil de dose déposé dans un échantillon de Cirlex® de 1 mm. Les conditions de type géostationnaire ont été reproduites. La simulation a permis de reproduire une irradiation d’une durée de 10 heures.

On remarque que le profil de dose des équations déterministes semi-empiriques est en bon accord avec la méthode Monte-Carlo. Bien que peu significatives, il existe entre les deux profils, pour des épaisseurs inférieures à 100 μm, de légères différences qui s’étendent de 10% à 20%. Cela peut s’attribuer à un petit échantillonnage des faibles énergies.

J’ai présenté dans cette partie l’interaction électron-matière. Pour comprendre le comportement en charge des polymères sous irradiation spatiale, il faut aussi modéliser le transport de charges.

2.3 Modèles du calcul de conductivité

Différents modèles permettent de calculer la conductivité d’un matériau sous irradiation. Il existe le *modèle de Fowler* (J. F. Fowler [53]) qui est macroscopique et purement empirique. Il est présenté dans la partie 2.3.1. Il y a également le *modèle de Génération-Recombinaison*, appelé modèle de GR (G. M. Sessler, M. T. Figueiredo *et al* [54], L. W. Parker et A. Meulenberg [55] et O. B. Evdokimov et Y. A. Solovyov [56]), qui est microscopique et

semi-empirique. Contrairement au *modèle de Fowler*, il calcule la conductivité à l'aide des densités de charges et de leurs mobilités. Je présenterai une alternative au modèle de GR par rapport au calcul de la mobilité des charges. Il s'agit du modèle *d'hopping*, qui est basé sur une approche quantique. Pour des raisons qui seront détaillées dans les parties 2.3.2, 2.3.3 et 2.3.4, je montrerai que le modèle THEMIS se base uniquement sur le modèle de GR détaillé dans la partie 2.3.2. Il s'agit du modèle le plus adapté pour décrire les niveaux de conductivité, de densités de charges et de potentiel d'un matériau sous irradiation.

2.3.1 Modèle de Fowler

En 1956 J. F. Fowler [53] développe l'un des premiers modèles pour décrire la conductivité induite dans les polymères irradiés. J. F. Fowler se base sur la théorie des bandes pour établir son modèle et considère que, sous irradiation, les électrons du cortège atomique ont suffisamment d'énergie pour devenir libres et conduire. J. F. Fowler a fait deux hypothèses. Dans la première hypothèse il considère qu'il n'y a qu'un seul type de charges mobiles. D'autres auteurs tels que J. C. Gillespie [57] considèrent également que les seules charges mobiles sont les électrons. Contrairement aux trous, les électrons ont une mobilité très importante avec plusieurs ordres de grandeur au-dessus. Dans la deuxième hypothèse, J. F. Fowler considère que la phase stationnaire est atteinte. Cela signifie que la génération d'électrons libres est en équilibre avec le taux de recombinaison entre les électrons libres et les trous piégés. Cet équilibre est décrit par l'équation suivante :

$$Q = \alpha n(n + n_t) \approx \alpha n n_t \quad (2.3.1.1.1)$$

Q est le taux de génération de charges ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$) lié à l'ionisation du polymère, α est le taux de recombinaison entre électrons et trous, n est la densité d'électrons libres et n_t est la densité d'électrons piégés. J. F. Fowler suppose que le courant induit sous irradiation dépend du débit de dose. Il trouve l'expression suivante :

$$I_{RIC} \propto D \dot{\text{dose}}^\Delta \quad (2.3.1.1.2)$$

I_{RIC} est le courant induit sous irradiation pour un champ électrique fixe, $D \dot{\text{dose}}$ le débit de dose ($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) et Δ une constante déterminée expérimentalement. J. F. Fowler travaillait à champ électrique constant. Or, en environnement spatial, ce dernier change au cours du temps. On généralise l'équation de J. F. Fowler en travaillant avec la conductivité induite sous irradiation σ_{RIC} au lieu du courant I_{RIC} . Pour obtenir σ_{RIC} , on divise l'équation (2.3.1.1.2) par le champ électrique. σ_{RIC} varie en fonction du débit de dose $\dot{D}$ d'après l'équation suivante :

$$\sigma_{RIC} = k_{RIC} \dot{D}^\Delta \quad (2.3.1.1.3)$$

σ_{RIC} a pour unité $\Omega^{-1}.m^{-1}$. Les constantes k_{RIC} et Δ sont déterminées expérimentalement et dépendent du matériau irradié. Δ dépend de la distribution énergétique des pièges du polymère et satisfait la condition suivante : $0.5 < \Delta < 1$. Pour une distribution uniforme $\Delta = 1$ et pour une distribution exponentielle Δ se rapproche de 0.5 [53]. En 1981 B. Gross, R. M. Faria *et al* [58] ont travaillé sur l'irradiation d'un échantillon de Téflon® FEP de 25 μm par rayon X mono-énergétique en utilisant la relation développée par J. F. Fowler. Ils ont, par mesure du courant, déterminé les valeurs des coefficients k_{RIC} et Δ . La valeur de 7.5×10^{-17} a été trouvée pour k_{RIC} et 0.64 pour Δ . Des travaux similaires ont été conduits par G. M. Sessler, M. T. Figueiredo *et al* [54] sur d'autres polymères, comme le polypropylène, ou par T. Paulmier *et al* [59], [60] sur des polymères tels que le Kapton® HN, à base de polyimide. Ces matériaux ont été irradiés avec des faisceaux mono-énergétiques, dont l'énergie et le flux sont constants en fonction du temps d'irradiation. Ils ont réussi à reproduire les résultats expérimentaux en utilisant le modèle développé par J. F. Fowler.

Le modèle de calcul de la conductivité présenté dans cette partie est très simple. Il s'agit d'un modèle analytique empirique qui possède peu de paramètres et faciles à déterminer expérimentalement. Pour ces raisons, il s'agit de nos jours d'un modèle très utilisé. De nombreux outils numériques (DICTAT, MCICT et NUMIT : [61]–[63]) utilisés pour la prédiction du comportement en charge des polymères sous irradiation spatiale l'utilisent. Néanmoins, ce modèle a quelques défauts. D'après les hypothèses de J. F. Fowler, le transport de charges se limite à une seule espèce et concerne la phase où le courant est stationnaire. La première hypothèse est vraie pour certains polymères, mais pas pour tous. Des expériences réalisées à l'ONERA [31], décrites dans le chapitre 3, montrent qu'il est nécessaire de prendre en compte le comportement des trous. Concernant la deuxième hypothèse : les satellites sont soumis à des radiations dont les énergies et flux changent dans le temps, par exemple lors d'orages magnétiques. De ce fait, il est peu probable qu'un état stationnaire soit atteint à moyen ou long terme pour un satellite en vol. Ajouté à cela, le modèle de *Fowler* ne prend pas en compte l'historique radiatif puisqu'il ne calcule pas les densités de charges. Par exemple, un matériau irradié une première fois, laissé non irradié un certain temps, puis irradié une seconde fois, n'aura pas le même comportement en charge lors de la deuxième irradiation que lors de la première. Pour comprendre le comportement en charge de la deuxième irradiation, il est nécessaire de connaître l'état du matériau (niveaux de densités de charges et de champ électrique) juste avant le début de la deuxième irradiation. Or, le modèle de *Fowler* ne permet pas de connaître ces informations, ce qui est le cas du modèle de GR décrit dans la partie suivante. Finalement, le modèle de *Fowler* est un modèle sans dimension. Il ne prend pas en compte les inhomogénéités volumiques de densités de charges ou de champ électrique.

2.3.2 Modèle de Génération-Recombinaison

Pour pallier aux défauts du modèle de *Fowler*, je présente dans cette partie un modèle microscopique pour calculer la conductivité. Il propose une approche semi-empirique qui est bien plus représentative des phénomènes physiques qui la gouvernent. Dans ce modèle, la conductivité est calculée par connaissance des densités de charges et de leur mobilité :

$$\sigma = \rho\mu \quad (2.3.2)$$

ρ est la densité des charges et μ sa conductivité. Nous verrons que ce modèle est plus raffiné que le modèle de *Fowler* car il nécessite une bonne connaissance des propriétés électriques intrinsèques du matériau.

2.3.2.1 Modèle de Génération-Recombinaison sans effet du champ électrique et de la température

Le modèle de GR ([54]–[56]) considère deux espèces (électrons et trous) responsables du transport de charges. Il considère que les niveaux de pièges peuvent être décrits avec une distribution énergétique discrète. En considérant les électrons et les trous, la conductivité est calculée avec l'équation suivante : $\sigma = en\mu_n + ep\mu_p$. Les densités de charges sont calculées par un système d'équations aux dérivées partielles non linéaire d'ordre un. Leurs mobilités sont calculées de manière semi-empirique, par comparaison des résultats de simulation avec les résultats expérimentaux. Ce système est obtenu en réalisant un bilan sur la densité des charges, pour chaque espèce (électrons libres, électrons piégés, trous libres et trous piégés), en utilisant l'équation de conservation des densités de charges (2.1.3) présentée dans la partie 2.1 :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = g(x, t) + \frac{\partial j_0}{\partial x} - \sum_i \left(\alpha n p_t^i - \frac{n}{\tau_n^i} + \frac{n_t^i}{\tau_{n_t}^i} \right) - \nabla (J_n^{Diffusion} + J_n^{Conduction}) \quad (2.3.2.1.1)$$

$$\sum_i \frac{\partial n_t^i}{\partial t} = \sum_i \left(\frac{n}{\tau_n^i} - \frac{n_t^i}{\tau_{n_t}^i} - \alpha n p_t^i \right) \quad (2.3.2.1.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g(x, t) - \sum_i \left(\alpha n_t^i p - \frac{p}{\tau_p^i} + \frac{p_t^i}{\tau_{p_t}^i} \right) + \nabla (J_p^{Diffusion} + J_p^{Conduction}) \quad (2.3.2.1.3)$$

$$\sum_i \frac{\partial p_t^i}{\partial t} = \sum_i \left(\frac{p}{\tau_p^i} - \frac{p_t^i}{\tau_{p_t}^i} - \alpha n p_t^i \right) \quad (2.3.2.1.4)$$

$$J_n^{Conduction} = n\mu_n E \quad (2.3.2.1.5)$$

$$J_p^{Conduction} = p\mu_p E \quad (2.3.2.1.6)$$

$$J_n^{Diffusion} = D_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (2.3.2.1.7)$$

$$J_p^{Diffusion} = D_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (2.3.2.1.8)$$

En utilisant la formule (2.2.2) du calcul de la dose, il est possible de calculer le taux de génération des paires électron-trou dans un matériau irradié :

$$g(x, t) = \frac{j_0 Dose(x, W)}{3eE_g} \quad (2.3.2.1.9)$$

$g(x, t)$ est en $m^{-3}.s^{-1}$ et dépend de la densité surfacique de courant incident j_0 ($A.m^{-2}$), de la dose ($keV.m^{-1}$), de la charge élémentaire e (C) et de l'énergie de gap du matériau E_g (keV). $\partial j_0 / \partial x$ est le terme d'implantation des électrons. τ_n^i et τ_p^i sont respectivement les temps caractéristiques de piégeage et de dé-piégeage des électrons et des trous libres, correspondant au piège de niveau d'énergie i . $\tau_{n_t}^i$ et $\tau_{p_t}^i$ sont respectivement les temps caractéristiques de dé-piégeage des électrons et des trous piégés, correspondant au piège de niveau d'énergie i . α est le coefficient de recombinaison entre les électrons et les trous. $J_n^{Diffusion}$ et $J_p^{Diffusion}$ sont les courants de diffusion des électrons et des trous libres. $J_n^{Conduction}$ et $J_p^{Conduction}$ sont les courants de conduction des électrons et des trous libres. μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous. D_n et D_p sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous. Grâce à la loi de Nernst-Einstein et en utilisant la constante de Boltzmann k_b , la température T et la charge élémentaire e , il est possible de relier les coefficients de diffusion aux coefficients de conduction :

$$D_{n/p} = \frac{\mu_{n/p} \times k_b \times T}{e} \quad (2.3.2.1.10)$$

En résolvant ces équations, les valeurs de $n(x, t)$ et $p(x, t)$ deviennent connues. On peut alors calculer $\sigma = en\mu_n + ep\mu_p$. Les valeurs de μ_n et μ_p sont obtenues de telle sorte que les résultats de simulation concordent avec les résultats expérimentaux (chapitres 3 et 4).

2.3.2.2 Modèle de Génération-Recombinaison simplifié sans effet du champ électrique et de la température

Une approche simplifiée du modèle de GR a été proposée par d'autres auteurs tels que L. W. Parker et A. Meulenberg [55] ou R. C. Hughes et R. J. Sokel [64]. Ces derniers considèrent un seul niveau de piège. Cela signifie que l'indice i , présenté dans les équations (2.3.2.1.1) à (2.3.2.1.4), vaut 1. Dans ce cas, il existe seulement les pièges énergétiquement peu profonds et très profonds. Les charges qui interagissent avec les pièges peu profonds ont une cinétique de piégeage/dé-piégeage et de sauts inter-pièges très rapide. Cette cinétique est modélisée par les mobilités effectives μ_n et μ_p . Les charges piégées dans les pièges très profonds sont modélisées par des temps caractéristiques de piégeage (τ_n et τ_p) et de dé-piégeage (τ_{nt} et τ_{pt}). Souvent, les temps caractéristiques de dé-piégeage sont extrêmement longs. En fonction des matériaux et de l'espèce considérée (électron ou trou), ce temps peut varier de quelques heures à quelques années.

2.3.2.3 Modèle de Génération-Recombinaison simplifié avec effet du champ électrique et de la température

Le modèle de GR peut être amélioré en ajoutant l'effet du champ électrique sur certains de ses termes. En 1938, L. Onsager [27] a montré que la génération de paires électron-trou dépend du champ électrique et de la température. J. Frenkel [35] a montré la même année que le dé-piégeage des charges dépend du champ électrique. Pour les pièges peu profonds, cela se modélise par une mobilité effective dépendante du champ électrique. Pour les pièges profonds, cela se modélise par un temps caractéristique de dé-piégeage des charges dépendant du champ électrique et de la température. La plupart de ces effets a déjà été mis en évidence expérimentalement ([21], [28], [40], [65]–[69]). La prise en compte du champ électrique et de la température sur ces trois termes est décrite ci-dessous.

2.3.2.3.1 Génération de paires électron-trou

Le terme de génération de paires électron-trou $g(x, t)$ dépend du champ électrique et de la température : $g(x, t) = g(x, t, E, T)$. Une expression analytique a été donnée par A. Tyutnev, V. Saenko *et al* [66]. Ainsi, sous irradiation, en fonction du champ électrique et de la température, la probabilité qu'un électron échappe à la recombinaison géminée avec son atome parent s'écrit :

$$\varphi(T, E) = \varphi_0 \exp\left(\frac{r_c \exp(-\zeta) - 1}{r_0 \zeta}\right) \quad (2.3.2.3.1.1)$$

$$r_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 k_b T} \quad (2.3.2.3.1.2)$$

$$\zeta = \frac{eEr_0}{k_b T} \quad (2.3.2.3.1.3)$$

r_c et r_0 sont des distances caractéristiques. r_0 est le rayon de thermalisation. C'est la distance caractéristique à laquelle l'électron s'éloigne de son atome parent avant qu'il y ait recombinaison géminée ou extraction définitive. ϵ_r est la permittivité relative du diélectrique. T est la température et k_b la constante de Boltzmann. φ_0 est le rendement de production de paires d'ions thermalisés par électron absorbé. Comme nous le verrons dans le chapitre 4, φ_0 et r_0 sont déterminés par comparaison des résultats de simulations aux résultats expérimentaux. Le terme de génération $g(x, t, E, T)$ se calcule en utilisant les équations (2.3.2.3.1.1) et (2.3.2.1.9) :

$$g(x, t, T, E) = \varphi_0 \exp\left(\frac{r_c \exp(-\zeta) - 1}{r_0 \zeta}\right) \times \frac{j_0 Dose(x, W)}{3eE_g} \quad (2.3.2.3.1.4)$$

A noter : à ce jour, il semble qu'aucune expression théorique de r_0 n'existe, ce qui est d'autant plus difficile à déterminer pour des polymères tels que le Kapton® HN, qui ont des structures physico-chimiques complexes.

2.3.2.3.2 Mobilité des charges : pièges peu profonds

Comme le montre J. Frenkel [35], l'effet du champ électrique favorise le dé-piégeage des charges, quelle que soit la profondeur du piège. Pour les pièges peu profonds, A. Tyutnev, V. Saenko *et al* [67] ont utilisé les travaux de J. Frenkel pour modéliser la cinétique de piégeage, dé-piégeage et de sauts inter-pièges en fonction du champ électrique. Cela se traduit par une mobilité effective des charges qui dépend du champ électrique : $\mu_n = \mu_n(E)$ et $\mu_p = \mu_p(E)$. Ils la modélisent de la manière suivante :

$$\mu_n(E) = \mu_{n_0} \exp(\beta\sqrt{E}) \quad (2.3.2.3.2.1)$$

$$\mu_p(E) = \mu_{p_0} \exp(\beta\sqrt{E}) \quad (2.3.2.3.2.2)$$

μ_{n_0} et μ_{p_0} sont les mobilités des électrons et des trous libres à champ nul. β est un paramètre représentatif des effets du champ électrique sur le dé-piégeage des charges. Il représente l'augmentation de la probabilité d'échappement des charges depuis les pièges, par effet tunnel [70], et par effet Poole-Frenkel [70], lié à un abaissement de la barrière de potentiel du piège. β , μ_{n_0} et μ_{p_0} sont tous déterminés expérimentalement. Les expériences relatives à leur détermination sont présentées dans le chapitre 4. Une illustration de cette cinétique de piégeages/dé-piégeages consécutifs est représentée sur la figure ci-dessous.

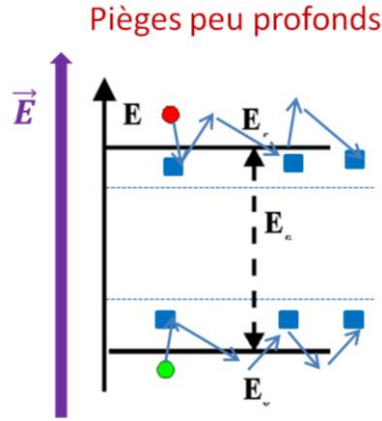


Figure 2.32 : Piégeages et dé-piégeages successifs des charges, vers et en provenance des pièges peu profonds. Les effets physiques mis en jeu sont : l'effet tunnel et l'effet Poole-Frenkel.

2.3.2.3.3 Temps caractéristique de dé-piégeage des charges : pièges profonds

Comme le montre J. Frenkel [35], les effets du champ électrique et de la température abaissent la barrière de potentiel des pièges, ce qui permet aux charges de se dé-piéger plus facilement. Pour les pièges profonds, l'écart énergétique entre le piège et la bande de conduction/valence ou le piège et un autre piège est trop grand pour que l'effet tunnel soit présent. Ainsi, seul l'effet Poole-Frenkel est considéré pour les pièges profonds. Considérons une charge m qui représente un électron ou un trou. Les effets du champ électrique et de la température sur le temps caractéristique de dé-piégeage des charges peuvent être modélisés comme suit :

$$\frac{1}{\tau_{m_t}} = \frac{1}{\tau_{m_{t0}}} \times \exp\left(\frac{-eE_g + \beta_{PF}\sqrt{E}k_bT}{k_bT}\right) \quad (2.3.2.3.3.1)$$

$$\beta_{PF} = \frac{\left(\frac{e^3}{\pi\epsilon_r\epsilon_0}\right)^{1/2}}{k_b T} \quad (2.3.2.3.3.2)$$

$\tau_{m_{t0}}$ est le temps caractéristique de dé-piégeage des charges à champ électrique nul. E_g est l'énergie de gap du polymère. β_{PF} est appelé coefficient de Poole-Frenkel. Il dépend de la constante de Boltzmann k_b , de la permittivité du vide ϵ_0 , de la permittivité relative du polymère ϵ_r et de la température T . Une analyse plus approfondie de l'effet du champ électrique sur le dé-piégeage des charges sera faite dans le chapitre 4. Une illustration de la cinétique de dé-piégeage est représentée sur la figure ci-dessous.

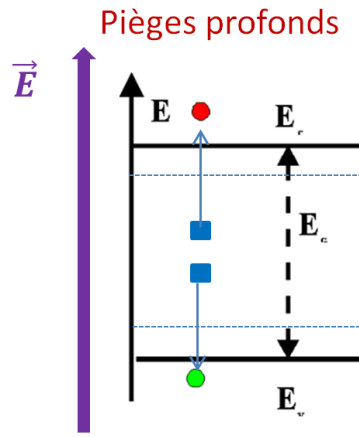


Figure 2.33 : Dé-piégeage des charges en provenance des pièges profonds. L'effet physique principal mis en jeu est l'effet Poole-Frenkel.

A noter : β et β_{PF} sont deux paramètres liés, car ils prennent tous deux en compte l'effet Poole-Frenkel. β est un facteur qui pondère l'effet Poole-Frenkel et l'effet tunnel. Il est déterminé expérimentalement et ajusté numériquement, à l'aide du modèle THEMIS, comme nous le verrons dans le chapitre 4. β_{PF} est calculé par sa formule théorique (2.3.2.3.3.2).

2.3.3 Modèle d'hopping : alternative pour le calcul de la mobilité ?

La distribution de la densité de pièges est une notion discutée. Le modèle de GR présenté propose une approche discrète dans la description des niveaux de pièges. Certains auteurs, tels que J. F. Fowler [53], N. F. Mott [71] ou B. Gross, G. M. Sessler *et al* [72] proposent une approche continue basée sur des considérations quantiques: c'est le modèle *d'hopping*. Ce modèle suggère une description continue et parabolique des niveaux de pièges (Figure 2.34). Une telle approche nécessiterait de passer d'une somme discrète à une somme continue (intégrale) dans les équations (2.3.2.1.1) à (2.3.2.1.4). V. Adamec et J. H. Calderwood

[73] ont travaillé sur ce modèle et proposent en conséquence une expression probabiliste (ou quantique) de la mobilité des charges :

$$\mu_{hopping} = \frac{\vartheta_{ph}\delta}{3E} \exp\left(-\frac{\lambda}{kT}\right) \sinh\left(\frac{eE\delta}{2kT}\right) \quad (2.3.3)$$

ϑ_{ph} , la fréquence des phonons (il s'agit de la fréquence de vibration du réseau atomique), δ une distance de saut caractéristique entre deux pièges consécutifs et λ l'énergie moyenne nécessaire pour qu'un électron puisse sauter d'un piège à un autre.

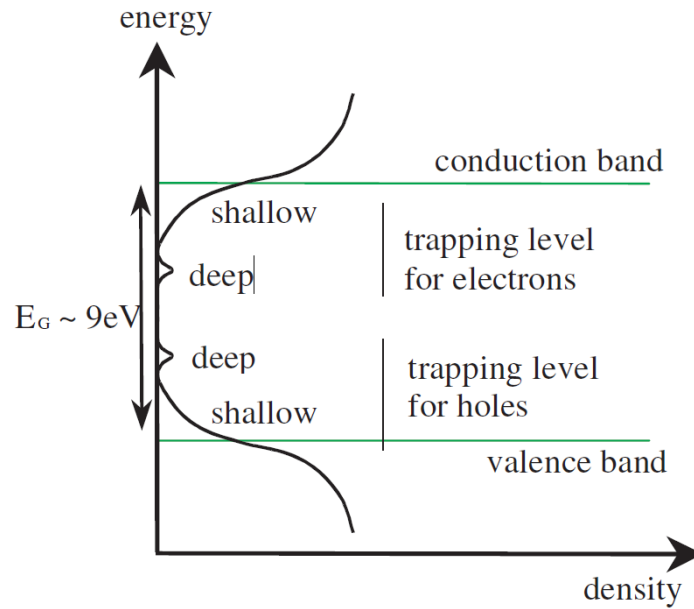


Figure 2.34 : Représentation schématique de la densité de pièges dans un polymère. Source : [74].

L'inconvénient majeur du modèle *d'hopping* est qu'il est difficile à appliquer. Il nécessite une connaissance encore plus précise, par rapport au modèle de GR, de la structure du polymère et de paramètres au niveau atomique pour calculer la mobilité effective des charges. Il faut connaître la distribution énergétique des pièges, la fréquence de vibration du réseau et la distance de sauts inter-piège pour calculer les densités de charges et leur mobilité, ce qui est difficilement envisageable. Par ailleurs, cette approche ne prend en compte qu'une seule espèce dans le transport de charges. Or, comme nous le verrons dans le chapitre 3, des expériences menées à l'ONERA [31] ont montré qu'il est nécessaire de considérer les électrons et les trous.

2.3.4 Comparaison des différents modèles

Le modèle de GR présenté précédemment a de nombreux avantages par rapport au modèle de *Fowler* et *d'hopping* :

- Contrairement au modèle de *Fowler*, les mobilités des charges sont prises en compte. Cela en fait un modèle plus représentatif des phénomènes physiques relatifs à la conductivité induite sous irradiation.
- En utilisant un système d'équations aux dérivées partielles, il permet, contrairement au modèle de *Fowler*, de connaître à tout moment l'historique radiatif du matériau. Il peut décrire les évolutions de la conductivité des polymères pour des cas d'irradiation représentatifs des conditions spatiales, où les énergies et les flux changent rapidement dans le temps. Il n'est pas nécessaire de se trouver dans un état stationnaire pour décrire le comportement en charge du polymère sous irradiation.
- Il prend en compte les électrons et les trous pour décrire la conductivité induite sous irradiation, ce que les modèles de *Fowler* et *d'hopping* ne font pas. Ces derniers ne considèrent que les électrons.

Pour ces raisons, les modèles de *Fowler* et *d'hopping* ne sont pas retenus. Le modèle de THEMIS est construit sur la base du modèle de GR et est présenté dans la partie 2.4.

2.4 Construction du modèle THEMIS

2.4.1 Le modèle de Résistance-Capacité

Un modèle physique, développé à l'ONERA (T. Paulmier, B. Dirassen *et al* [40], R. Hannah, T. Paulmier *et al* [1] et [12]) permet de calculer les niveaux de potentiels des polymères sous irradiation spatiale par connaissance des densités de charges. Ce modèle utilise le modèle de l'électrostatique simplifié présenté dans la partie 2.1. Plus précisément, il se base sur l'approximation RC. Pour calculer les densités de charges, il utilise le modèle GR. En revanche, les courants de diffusion et de conduction ne sont pas pris en compte. Le terme de génération est constant et uniforme en volume, c'est-à-dire qu'il ne varie pas en fonction de l'épaisseur du matériau. L'implantation des électrons n'est pas prise en compte dans le modèle RC.

Les approximations du modèle RC sont correctes si l'implantation des électrons dans le matériau n'est pas distribuée. Elle doit avoir lieu dans un seul plan, localisée, et perpendiculaire à la direction d'irradiation. En environnement spatial cela est rarement vrai puisque les spectres d'électrons sont composés d'énergies variées. La génération de paires électron-trou n'est donc pas homogène dans le matériau, l'implantation des électrons est distribuée en volume et le barycentre du plan de charge n'est pas constant dans le temps. Il peut changer en fonction du

temps d'irradiation. De ce fait, le potentiel de surface du polymère ne peut pas toujours être assimilable au potentiel macroscopique et l'approximation $E = V/d$ n'est pas correcte. La densité de courant induit sous irradiation J_{vol} ne peut alors plus être calculée en utilisant le champ électrique macroscopique. Il devient nécessaire de considérer le matériau au minimum en 1D et de calculer J_{vol} à une échelle microscopique grâce au champ électrique local et à l'équation de Poisson.

2.4.2 Le modèle THEMIS

2.4.2.1 Description en volume

Dimensionnalité :

L'une des principales limites du modèle RC est sa dimensionnalité : il s'agit d'un modèle 0D. En effet, pour le transport de charges, il utilise le modèle de GR simplifié, mais ne prend pas en compte les courants de diffusion et de conduction. Cette limite justifie la construction d'un nouveau modèle : THEMIS. THEMIS peut être résolu en différentes dimensionnalités : en 1D, 2D ou 3D. Cela veut dire que les modèles de calcul des niveaux de potentiels, d'interaction électron-matière et de transport de charges peuvent être considérés en 1D, 2D ou 3D. Dans le cadre de cette thèse, nous nous sommes concentrés sur la validation physique du modèle, avec l'approche 1D qui a été choisie. Pour l'interaction électron-matière, cela se justifie par le caractère isotrope des irradiations effectuées à l'ONERA. En effet, les irradiations sont faites à incidence normale et toute la surface du polymère est irradiée. Cela permet de considérer que le matériau est irradié identiquement dans tout plan transversal par rapport à l'irradiation, quelle que soit la profondeur du matériau. Pour le transport de charges, on suppose qu'il s'effectue dans une seule direction. Cela se justifie par la profondeur du matériau, très faible en comparaison de ses dimensions latérales. De ce fait, le champ électrique est beaucoup plus important dans l'axe de la profondeur que dans les autres directions. Par conséquent, les courants de conduction dominant dans le sens de la profondeur. En 1D, il est possible d'être plus représentatif de l'interaction électron-matière (profil de dépôt de dose et d'implantation) et du transport de charges. On peut travailler avec des spectres d'électrons distribués en énergie. Les avantages du 1D par rapport au 0D seront présentés plus en détail dans le chapitre 3. Je présente ci-dessous le modèle THEMIS.

Interaction électron-matière :

Pour le modèle de l'interaction électron-polymère nous avons choisi d'utiliser les équations analytiques empiriques décrites dans la partie 2.2.2. Elles sont beaucoup plus faciles à implémenter que les méthodes Monte-Carlo et leur temps de calcul est significativement plus court.

Transport de charges :

Pour le modèle du transport de charges, nous avons construit THEMIS en utilisant le modèle de GR simplifié avec effet de champ électrique et de température sur la génération de paires électron-trou et sur le transport de charges. Le système des équations de conservation des densités de charges devient alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t}(x, t) = & g(x, t, T, E) + \frac{\partial j_0}{\partial x} - \alpha_1 n p_t - \alpha_2 n p - \frac{n}{\tau_n} + \frac{n_t}{\tau_{n_t}(E, T)} \\ & - \nabla \left(D_n \frac{\partial n}{\partial x} + n \mu_{n0} \exp(\beta \sqrt{E}) E \right) \end{aligned} \quad (2.4.2.1.1)$$

$$\frac{\partial n_t}{\partial t}(x, t) = \frac{n}{\tau_n} - \frac{n_t}{\tau_{n_t}(E, T)} - \alpha_3 n_t p \quad (2.4.2.1.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t}(x, t) = & g(x, t, T, E) - \alpha_3 n_t p - \alpha_2 n p - \frac{p}{\tau_p} + \frac{p_t}{\tau_{p_t}(E, T)} \\ & + \nabla \left(D_p \frac{\partial p}{\partial x} + p \mu_{p0} \exp(\beta \sqrt{E}) E \right) \end{aligned} \quad (2.4.2.1.3)$$

$$\frac{\partial p_t}{\partial t}(x, t) = \frac{p}{\tau_p} - \frac{p_t}{\tau_{p_t}(E, T)} - \alpha_1 n p_t \quad (2.4.2.1.4)$$

On note que, contrairement au modèle de GR, le modèle de THEMIS distingue les coefficients de recombinaison : α_1 , α_2 et α_3 . Ils correspondent respectivement à la probabilité de recombinaison entre électron libre – trou piégé, électron libre – trou libre et trou libre – électron piégé. Leur influence sur les niveaux de potentiel sera détaillée dans le chapitre 3.

Calcul des niveaux de potentiel :

Pour calculer les niveaux de potentiels, THEMIS utilise l'équation de Poisson présentée dans la partie 2.1. Cette équation est combinée aux équations de conservation des densités de charges précédentes. Cela permet, en fonction du temps d'irradiation et de la profondeur du matériau, de connaître les niveaux de charges et les niveaux de potentiels.

2.4.2.2 Description aux interfaces

Il existe deux catégories d'interface : l'interface entre le vide et le polymère et l'interface entre le polymère et le métal. L'écoulement des charges aux interfaces est décrit ci-dessous.

- Interface vide-polymère

Sur la Figure 2.35, à l'interface vide-polymère, les courants de conduction/diffusion des électrons et des trous sont nuls. Cela signifie qu'aucun électron ou trou ne transite par effet de conduction/diffusion entre le vide et le polymère. Ces deux conditions sont satisfaites par les équations (2.4.2.2.1) et (2.4.2.2.2).

$$J_n(x, t)|_{x=0} = 0 \quad (2.4.2.2.1)$$

$$J_p(x, t)|_{x=0} = 0 \quad (2.4.2.2.2)$$

- Interface polymère-métal

A l'interface polymère-métal, j'ai décrit dans le chapitre précédent que le contact est de type Schottky (G. M. Sessler et M. G. Broadhurst [32]) et que les charges ne peuvent passer que dans un sens. Pour comprendre le comportement des charges à l'interface je présente deux cas. Un premier cas lorsque le champ électrique est négatif et un deuxième cas lorsqu'il est positif (Figure 2.35).

Lorsque le champ électrique est négatif, les électrons générés par irradiation à l'interface conduisent librement dans le métal et les trous dans le volume du polymère. En revanche, aucun trou ne peut provenir du métal vers le polymère. Ces conditions se traduisent par les équations (2.4.2.2.3) et (2.4.2.2.4).

$$\nabla \cdot J_n(x, t)|_{x=d} = 0 \quad (2.4.2.2.3)$$

$$J_p(x, t)|_{x=d} = 0 \quad (2.4.2.2.4)$$

Lorsque le champ électrique est positif, le comportement des charges s'inverse. Les trous générés à l'interface par irradiation se dirigent vers le métal mais ne peuvent pas y pénétrer. La conduction dans un métal est uniquement gouvernée par la délocalisation des électrons. Nous considérons alors que les trous recombinent à l'interface avec les électrons du métal. Cette condition se traduit par une fuite de trous dans le métal, bien que physiquement ce ne soit pas possible. Les électrons générés à l'interface se dirigent dans le volume du polymère. En revanche, à cause de la barrière Schottky, aucun électron du métal ne peut aller dans le polymère. Ces conditions sont satisfaites par les équations (2.4.2.2.5) et (2.4.2.2.6).

$$J_n(x, t)|_{x=d} = 0 \quad (2.4.2.2.5)$$

$$\nabla \cdot J_p(x, t)|_{x=d} = 0 \quad (2.4.2.2.6)$$

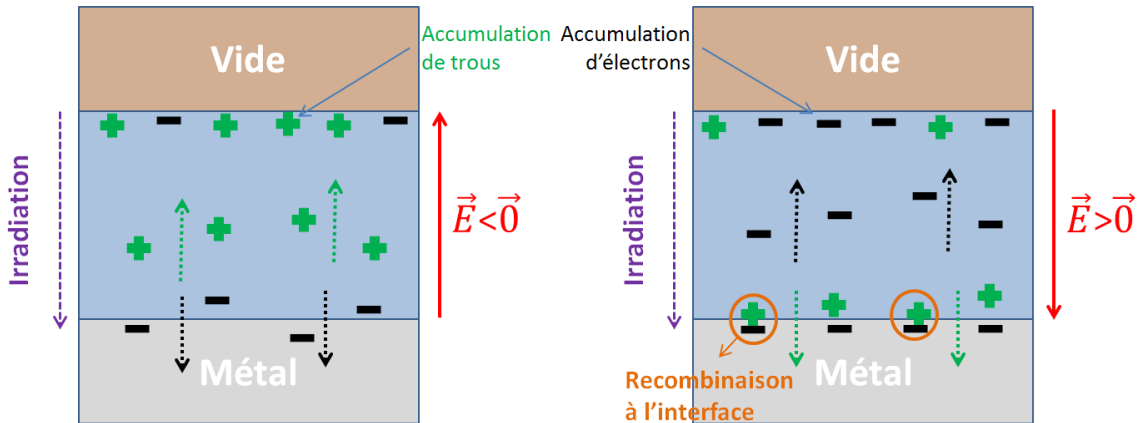


Figure 2.35 : Interfaces vide-polymère et polymère métal lorsque le champ électrique est soit négatif, soit positif.

2.4.2.3 Résumé des caractéristiques du modèle THEMIS

- 1) Le matériau est considéré en 1D. (Chapitre 3)
- 2) Les niveaux de potentiels sont calculés avec l'équation de Poisson. (Chapitre 3 et 4)
- 3) L'implantation, la dose déposée et le taux de génération de paires électron-trou sont calculés par des équations analytiques empiriques. (Chapitre 3 et 4)
- 4) Les densités de charges sont calculées par un système d'équations aux dérivées partielles. Un seul niveau de piège est considéré. (Chapitre 3 et 4)
- 5) Les électrons et les trous sont tous les deux considérés dans le transport de charges. (Chapitre 3 et 4)
- 6) L'effet du champ électrique et de la température sont pris en compte dans le terme de génération de paires électron-trou. (Chapitre 4)
- 7) L'effet du champ électrique est pris en compte dans la mobilité effective des charges. (Chapitre 4)
- 8) L'effet du champ électrique et de la température sont pris en compte dans le temps caractéristique de dé-piégeage des charges. (Chapitre 4)

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre j'ai présenté les principaux modèles liés à l'interaction électron-matière et au transport de charges. Leur analyse a permis de construire un nouveau modèle nommé THEMIS.

J'ai présenté deux modèles de l'interaction électron-matière : les modèles probabilistes, basés sur des algorithmes Monte-Carlo, et les modèles analytiques empiriques. Les modèles analytiques empiriques présentent un temps de calcul bien moindre que celui des simulations Monte-Carlo. De plus, leur implémentation est plus simple. Les résultats présentés dans la partie 2.2.3 ont montré que les résultats sont similaires pour les deux approches. Par conséquent, les équations analytiques empiriques sont préférées pour la réalisation de ces travaux.

J'ai présenté deux modèles représentatifs de la conductivité induite sous irradiation. Le premier est macroscopique et sans dimension (modèle de *Fowler*) et le deuxième est microscopique, plus raffiné et nécessite une compréhension plus étendue des propriétés électriques du polymère étudié (modèle de *GR*).

Le modèle de *Fowler* est un modèle simple, ne nécessitant pas de calculer la mobilité des charges (B. Gross, R. M. Faria *et al* [58] et G. M. Sessler, M. T. Figueiredo *et al* [54]). Il donne des résultats satisfaisants, mais qui concernent des cas d'irradiation simples (faisceau mono-énergétique) avec un état stationnaire atteint. En environnement spatial, les satellites sont soumis à des radiations dont les énergies et flux changent rapidement et périodiquement dans le temps. De ce fait, il est peu probable qu'un état stationnaire soit atteint à moyen ou long terme pour un satellite en vol. Par ailleurs, il ne considère qu'une seule espèce responsable du transport de charges et ne prend pas en compte l'historique radiatif du matériau. Des expériences menées à l'ONERA [31] ont montré que cela est nécessaire pour être le plus représentatif, à tout instant, des niveaux de charges. Finalement, dans ce modèle, la conductivité calculée ne tient pas compte des inhomogénéités de densités de charges et de champ électrique. Pour ces raisons, il est nécessaire de passer à un modèle plus raffiné.

Le modèle de *GR* nécessite de connaître certains paramètres du polymère étudié : mobilité des charges, temps caractéristique de piégeage, de dé-piégeage, coefficients de recombinaison, etc. Ces paramètres permettent de connaître, en fonction de la profondeur du matériau et du temps d'irradiation les niveaux des densités de charges, de champ électrique, de potentiel et de conductivité. Ce modèle a l'avantage de pallier aux défauts du modèle de *Fowler*, mais aussi de pouvoir caractériser un polymère avec suffisamment de précision, pour prédire et extrapoler son comportement en charge en fonction du temps et de l'environnement radiatif. Nous avons vu qu'il existe une alternative au calcul de la mobilité, en utilisant le modèle *d'hopping*. Il apparaît que ce modèle est très difficile à mettre en application et n'est pas choisi. Sur la base du modèle

de GR, le modèle THEMIS a été développé. Il utilise le modèle de GR simplifié avec l'effet du champ électrique et de la température. THEMIS permettra, dans le chapitre 3, de caractériser avec précision les propriétés électriques du Téflon® FEP, polymère fréquemment utilisé en environnement spatial. Sur la base de comparaisons croisées expériences-simulations, le comportement des charges dans ce matériau sous irradiation sera étudié. Le chapitre 3 se focalise sur l'avantage d'avoir un modèle 1D qui distingue le comportement des électrons et des trous et prend en compte leurs courants de conduction/diffusion. Le comportement du Kapton® HN sera également étudié dans le chapitre 3, mais beaucoup plus succinctement. Ce matériau a fait l'objet de recherches beaucoup plus poussées concernant d'éventuels effets non linéaires du champ électrique sur le comportement des charges. Cet effet sera détaillé et étudié dans le chapitre 4.

CHAPITRE 3. Modélisation du transport de charges de deux polymères – Conductivité constante avec le champ électrique

Dans le chapitre précédent, plusieurs modèles physiques décrivant les mécanismes d'interaction électron-matière et du transport de charges ont été présentés. Parmi ceux-ci, nous en avons sélectionné un seul, le modèle THEMIS, qui est décrit dans cette partie. Il s'agit d'un modèle 1D, déterministe et empirique. Dans la première partie de ce chapitre, le schéma numérique de THEMIS est présenté. Dans la deuxième partie, je présente le comportement en charge, évalué expérimentalement, sous irradiation, de deux polymères fréquemment utilisés en environnement spatial : le Téflon® FEP et le Kapton® HN. Le modèle de l'interaction électron-matière et du transport de charges de THEMIS est appliqué à ces deux polymères, pour expliquer leur comportement sous irradiation, et analyser leurs propriétés électriques (temps de piégeage, dé-piégeage, mobilités et taux de recombinaison). Dans ce chapitre, l'intérêt d'utiliser un modèle une dimension (1D) est mis en avant. Contrairement au modèle 0D, THEMIS permet d'être représentatif des profils d'implantation et de dose déposée. Il prend en compte, localement, les inhomogénéités de densités de charges et de champ électrique, responsables des effets dipolaires. Il considère donc, à l'échelle microscopique, les courants de diffusion et de conduction des électrons et des trous et les effets du champ électrique sur leur comportement. L'effet du champ électrique est détaillé dans le chapitre 4.

3.1 Implémentation du modèle THEMIS

Pour décrire l'interaction électron-matière, les profils de densités de charges, les niveaux de champ électrique ou de conductivité, il est nécessaire d'implémenter les équations décrites dans le chapitre 2. Pour cela, il faut d'abord créer un maillage représentatif du matériau étudié.

3.1.1 Création du maillage

Pour discrétiser spatialement un matériau, il faut créer un maillage représentatif de ce matériau. Le matériau est assimilé à un système discret, composé d'une succession de couches d'épaisseurs dx . Les couches successives sont reliées par des nœuds. Sur chaque nœud, le potentiel et les densités de charges sont calculées. Sur les inter-nœuds, le champ électrique et les courants sont calculés. Plus l'espacement entre deux nœuds (ou inter-nœuds) consécutifs est petit, plus le maillage est fin. Lorsque le maillage est fin, les valeurs du potentiel, des densités de charges, du champ électrique et des courants sont connues avec plus de précision. Les méthodes numériques employées étant d'ordre 1, la précision de la solution augmente linéairement avec le pas d'espace employé. Il existe différents types de maillage : le maillage uniforme ou le maillage non-uniforme. Un maillage uniforme présente un espacement régulier entre les nœuds. Un maillage non-uniforme ne présente pas d'espacement régulier entre les

nœuds, ce dernier augmente proportionnellement en fonction de la profondeur du matériau. La Figure 3.36 schématise un maillage uniforme et la Figure 3.37 un maillage mixte, composé d'une partie non-uniforme et d'une partie uniforme. L'avantage du maillage mixte est d'augmenter le raffinement du maillage dans une seule partie du matériau, et non sur son ensemble. Par exemple, pour décrire les phénomènes d'émission secondaire qui ont lieu en proche surface, à l'interface vide/matériau, il convient d'avoir un maillage plus fin sur zone. Il n'est pas nécessaire de raffiner le maillage en volume, ce qui permet de gagner en temps de calcul. Le maillage uniforme et le maillage mixte sont chacun définis par la position des nœuds x_i , la position des inter-nœuds $x_{i+1/2}$, l'écart entre deux nœuds consécutifs Δx_i et l'écart entre deux inter-nœuds consécutifs $\Delta x_{i+1/2}$. Pour ses avantages, un maillage mixte a été choisi pour construire le modèle numérique de THEMIS.

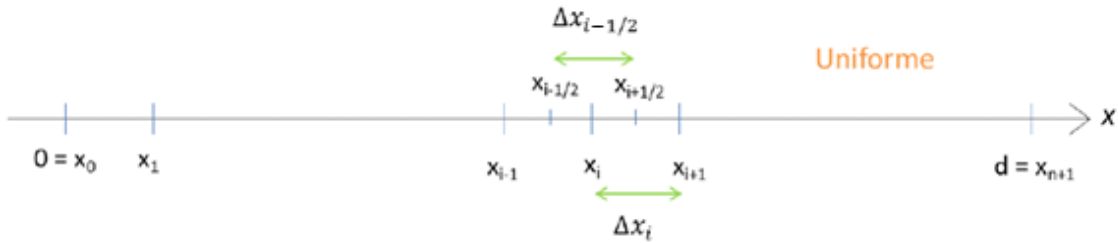


Figure 3.36 : Maillage uniforme.

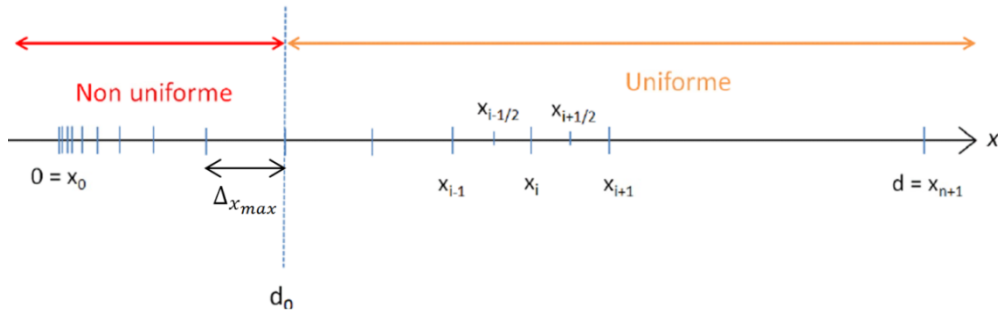


Figure 3.37 : Maillage mixte.

Le maillage mixte se construit à partir d'une zone non-uniforme et d'une zone uniforme. La zone uniforme est définie par 4 paramètres : l'épaisseur du matériau d_0 (Figure 3.37), la distance entre les nœuds 0 et 1 Δx_0 , la distance inter-nœud maximale à ne pas dépasser Δx_{max} et le facteur d'accroissement α_g qui détermine l'augmentation de la taille des mailles en fonction de la profondeur du matériau. α_g est la raison de la suite géométrique suivante, avec $\alpha_g > 1$:

$$\Delta x_i = \alpha_g \times \Delta x_{i-1} \quad (3.1.1.1)$$

L'accroissement de l'espacement entre deux nœuds consécutifs augmente en fonction de α , jusqu'à ce que l'écart entre deux nœuds consécutifs soit supérieur ou égal à $\Delta_{x_{max}}$. Si l'écart entre deux nœuds consécutifs est supérieur à $\Delta_{x_{max}}$, alors une homothétie est appliquée sur le maillage pour réduire la distance inter-nœuds. Il est nécessaire que le dernier nœud du maillage non-uniforme soit égal à $\Delta_{x_{max}}$. La taille des mailles du maillage uniforme est égale à la taille de la dernière maille du maillage non-uniforme. Cela permet de conserver la continuité de la distance inter-nœuds et d'éviter des erreurs de résolution numérique, quand on passe du maillage non-uniforme au maillage uniforme.

La dimension temporelle est également discrétisée. Les matériaux sont irradiés pendant des durées limitées et le temps d'irradiation est discrétisé. Cela signifie qu'un maillage temporel représentatif de l'irradiation doit être créé. Tout comme pour la discrétisation spatiale, le potentiel, le champ électrique, les courants ou les densités de charges sont discrétisés et calculés à des instants t^m donnés, séparés par des intervalles de temps constants Δt . Les indices m représentent la discrétisation temporelle.

3.1.2 Discrétisation et schéma numérique

Dans cette section, je présente les schémas numériques qui permettent de discrétiser les équations présentées dans le chapitre 2.

3.1.2.1 Densités de charges

L'équation (2.1.3), présentée dans le chapitre 2, représente la conservation locale de la charge électrique. Sous une forme plus générale, elle peut être écrite de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = f(t, \rho) \quad (3.1.2.1.1)$$

$f(t, \rho)$ est une fonction qui dépend du temps t et de la densité de charges ρ . ρ dépend du temps ce qui permet d'écrire : $\rho = \rho^m$ où m est un indice représentatif du temps pour lequel la densité des charges est calculée. Pour calculer la densité des charges à l'instant suivant ρ^{m+1} on peut utiliser 3 méthodes de discrétisation temporelle. Ce sont des méthodes d'ordre 1, appelées méthodes d'Euler, qui permettent de résoudre l'équation différentielle précédente.

- La méthode explicite calcule ρ à l'instant t^{m+1} en fonction de $f(t^m, \rho^m)$ qui prend en entrée t et ρ à l'instant m :

$$\rho^{m+1} = \rho^m + \Delta t \times f(t^m, \rho^m) \quad (3.1.2.1.2)$$

- La méthode implicite calcule ρ à l'instant t^{m+1} en fonction de $f(t^{m+1}, \rho^{m+1})$ qui prend en entrée t et ρ à l'instant t^{m+1} :

$$\rho^{m+1} = \rho^m + \Delta t \times f(t^{m+1}, \rho^{m+1}) \quad (3.1.2.1.3)$$

- La θ -méthode calcule ρ à l'instant t^{m+1} en fonction de $f(t^n, \rho^n)$ et $f(t^{n+1}, \rho^{n+1})$ qui prennent en entrée t et ρ aux instants m et $m + 1$:

$$\rho^{m+1} = \rho^m + \Delta t \times (f(t^{m+1}, \rho^{m+1}) + (1 - \theta)f(t^m, \rho^m)) \quad (3.1.2.1.4)$$

Actuellement, la méthode explicite est utilisée pour discrétiser les équations. Il s'agit de la méthode la plus simple à implémenter et à résoudre. En revanche, elle est admet des conditions de stabilité plus drastiques que les autres.

3.1.2.2 Courants de conduction et de diffusion

Rappelons l'équation (2.1.3) du chapitre 2 :

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \nabla \Gamma(x, t) = S(x, t) \quad (3.1.2.2.1)$$

En utilisant la méthode explicite présentée dans la section 3.1.2.1, discrétisons spatialement et temporellement cette équation. Les courants de conduction et de diffusion, représentés par $\nabla \Gamma(x, t)$, sont discrétisés par le schéma Donneur-Accepteur [75]. Cela permet d'obtenir l'équation suivante :

$$\frac{\rho_i^{m+1} - \rho_i^m}{\Delta t} = S_i^m + \frac{1}{\Delta x_i} \left(\Gamma_{i-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - \Gamma_{i+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right) \quad (3.1.2.2.2)$$

S_i^m est le terme source, qui dépend de la génération de paires électron-trou, du terme d'implantation, du piégeage, du dé-piégeage et des termes de recombinaison. Le terme de génération n'est pas considéré dépendant du champ électrique dans ce chapitre. La dépendance sera ajoutée dans le chapitre 4 qui traite exclusivement de l'influence du champ électrique sur l'interaction électron-matière et le transport de charges :

$$S_i^m = g_i^m + \frac{\partial j_0^m}{\partial x_i} - \alpha_{np_i} n_i^m p_{t_i}^m - \alpha_{np} n_i^m p_i^m - \frac{n_i^m}{\tau_n} + \frac{n_{t_i}^m}{\tau_{n_t}} \quad (3.1.2.2.3)$$

Γ est le flux de déplacement des charges. C'est donc le flux de conduction et de diffusion des électrons libres et des trous libres. Contrairement aux densités de charges, Γ s'exprime aux inter-nœuds. Considérons ρ la densité des charges. Alors les flux de conduction/diffusion peuvent se développer de la manière suivante :

$$\Gamma_{i-1/2}^{n+1/2} = (\rho \mu E)_{i-1/2}^{n+1/2} + (D \nabla \rho)_{i-1/2}^{n+1/2} \quad (3.1.2.2.4)$$

$$\Gamma_{i+1/2}^{n+1/2} = (\rho \mu E)_{i+1/2}^{n+1/2} + (D \nabla \rho)_{i+1/2}^{n+1/2} \quad (3.1.2.2.5)$$

Les flux de conduction des électrons et des trous s'expriment différemment en fonction du champ électrique. Les électrons se déplacent dans le sens opposé du champ électrique et les trous se déplacent dans le sens du champ électrique.

- Flux de conduction :

-Pour les trous :

$$(\rho \mu E)_{i+1/2}^{m+1/2} = \begin{cases} \rho_i^m \mu E_{i+1/2}^m & \text{si } \mu E_{i+1/2}^m > 0 \\ \rho_{i+1}^m \mu E_{i+1/2}^m & \text{si } \mu E_{i+1/2}^m < 0 \end{cases} \quad (3.1.2.2.6)$$

-Pour les électrons :

$$(\rho \mu E)_{i+1/2}^{m+1/2} = \begin{cases} \rho_i^m \mu E_{i+1/2}^m & \text{si } \mu E_{i+1/2}^m < 0 \\ \rho_{i+1}^m \mu E_{i+1/2}^m & \text{si } \mu E_{i+1/2}^m > 0 \end{cases} \quad (3.1.2.2.7)$$

- Flux de diffusion :

-Pour les trous et les électrons :

$$(D \nabla \rho)_{i+1/2}^{m+1/2} = \frac{D}{\Delta x_{i+1/2}} (\rho_{i+1}^m - \rho_i^m) \quad (3.1.2.2.8)$$

3.1.2.3 Potentiel électrostatique

L'équation de Poisson (2.1.1), décrite dans le chapitre 2, permet de relier le champ électrique à la densité totale de charges. Elle est discrétisée en utilisant la méthode explicite :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial x}\right)_i^m = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right)_i^m = \frac{\frac{V_{i+1}^m - V_i^m}{\Delta x_i} - \frac{V_i^m - V_{i-1}^m}{\Delta x_{i-1}}}{\frac{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}{2}} \quad (3.1.2.3.1)$$

$$\frac{2}{\Delta x_{i-1}(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})} V_{i-1}^m - \frac{2}{\Delta x_i \Delta x_{i-1}} V_i^m + \frac{2}{\Delta x_i(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})} V_{i+1}^m = -\frac{\rho_i^m}{\varepsilon} \quad (3.1.2.3.2)$$

L'équation précédente peut s'écrire plus généralement comme suit :

$$a_i x_{i-1}^m + b_i x_i^m + c_i x_{i+1}^m = d_i^m \quad (3.1.2.3.3)$$

Les coefficients a_i , b_i , c_i et d_i sont facilement associables aux coefficients de l'équation (3.1.2.3.2). Les inconnues x_i^m représentent les niveaux de potentiels et d_i^m les densités de charges. L'équation (3.1.2.3.3) peut s'écrire sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{k-1} \\ 0 & & & a_k & b_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_k \end{bmatrix}$$

Cette matrice tri-diagonale peut se résoudre grâce à l'algorithme de Thomas. Il s'agit d'un algorithme itératif optimisé pour traiter des systèmes d'équations matriciels ayant une matrice tri-diagonale. La méthode permet de déterminer les inconnues x_i^m et d_i^m grâce aux coefficients a_i , b_i et c_i pour chaque indice. Pour cela, il est nécessaire de connaître les conditions initiales avant le début de l'irradiation, lorsque $m = 0$, sur l'ensemble du maillage spatial : $d_i^{m=0}$ et $x_i^{m=0}$. Avant le début de l'irradiation, le matériau possède une quantité de charges libres et piégées infinitésimale, mais respecte le principe d'électroneutralité. La somme des charges est nulle en tout point du maillage spatial du matériau, ainsi que le potentiel:

$$\rho_i^{m=0} = d_i^{m=0} = 0 \quad (3.1.2.3.4)$$

Pour calculer, x_i^m il est nécessaire de calculer les coefficients a_i , b_i et c_i . A l'interface vide/matériau, nous savons déjà que $a_0 = 0$. b_0 et c_0 s'obtiennent grâce à la condition de Robin:

$$a_0 = 0 \quad (3.1.2.3.5)$$

$$b_0 = -\frac{1 + \varepsilon_0 \Delta_0}{d\varepsilon} \quad (3.1.2.3.6)$$

$$c_0 = 1 \quad (3.1.2.3.7)$$

Pour le calcul de a_k , b_k et c_k , où k est l'indice qui correspond à la maille du matériau à l'interface matériau/métal, nous savons déjà que $c_k = 0$. a_k et b_k se calculent grâce à la condition de Dirichlet qui donne :

$$a_k = 0 \quad (3.1.2.3.8)$$

$$b_k = 1 \quad (3.1.2.3.9)$$

$$c_k = 0 \quad (3.1.2.3.10)$$

Connaissant maintenant les expressions de $\rho_i^{m=0}$ et des coefficients a_i , b_i et c_i pour tout indice i , il devient possible de déterminer les niveaux de potentiels $V_i^{m=0} = x_i^{m=0}$ grâce à l'algorithme de Thomas décrit ci-dessous. L'idée principale consiste à calculer de nouvelles valeurs de c_i' et $\rho_i^{m=0'} = d_i'$ en utilisant les anciennes.

$$c_i' = \begin{cases} \frac{c_i}{b_i} & ; \quad i = 1 \\ \frac{c_i}{b_i - a_i c_{i-1}'} & ; \quad i = 2, 3, \dots, k-1 \end{cases} \quad (3.1.2.3.11)$$

$$(3.1.2.3.12)$$

$$d_i' = \begin{cases} \frac{d_i}{b_i} & ; \quad i = 1 \\ \frac{d_i - a_i d_i'}{b_i - a_i c_{i-1}'} & ; \quad i = 2, 3, \dots, k-1 \end{cases}$$

Les niveaux de potentiel sont ensuite obtenus par rétro-substitution :

$$V_k^{n=0} = x_k^{n=0} = d_k^{n=0'} \quad (3.1.2.3.13)$$

$$V_i^{n=0} = x_i^{n=0} = d_i^{n=0'} - c_i' x_{i+1}^{n=0} \quad ; i = k-1, k-2, \dots, 1 \quad (3.1.2.3.14)$$

Par suite, l'algorithme se généralise sur tout le maillage temporel et permet de déterminer par connaissance des densités de charges les niveaux de potentiels : $V_i^n = x_i^n$.

3.1.3 Vérification numérique de la discrétisation : convergence

Comme je l'ai présenté dans la partie 3.1 la résolution de l'équation de Poisson et de l'équation de conservation des densités de charges nécessite d'établir un maillage spatial et temporel. Il convient donc de discrétiser le problème en espace et en temps : Δx et Δt . La difficulté réside dans le choix des valeurs prises par Δx et Δt , puisque ces dernières doivent respecter la condition de Courant-Friedrichs-Lewy dite CFL :

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} > \mu(E) \times E \quad (3.1.3)$$

Cela signifie que le rapport entre le pas spatial et le pas temporel doit toujours être supérieur à la vitesse des porteurs de charge. Numériquement, si leur vitesse excède ce rapport, il n'est plus possible de suivre correctement le déplacement des charges dans le maillage ce qui crée de la diffusion numérique et une mauvaise résolution des équations. D'après cette équation, ce sont les charges les plus mobiles qui contraignent la condition CFL. Cette condition change d'un matériau à l'autre puisque la mobilité des charges change aussi d'un matériau à l'autre. Sous irradiation, il est important de vérifier quelle partie du matériau sera soumise aux champs électriques les plus intenses. De plus, comme indiqué dans la partie 3.1.1, un maillage mixte a été choisi pour construire le modèle numérique de THEMIS. Cela signifie que Δx est plus petit en surface du matériau qu'en volume. C'est donc dans cette partie du matériau qu'il faut faire le plus attention aux valeurs prises par Δx et Δt pour respecter la condition CFL. Il existe deux manières de respecter cette condition. Il est possible soit d'augmenter Δx soit de diminuer Δt . Augmenter Δx diminue le temps de calcul mais réduit la précision des résultats. Diminuer Δt

raffine l'échantillonnage temporel mais augmente le temps de calcul. La difficulté est de trouver un Δx et un Δt adéquates pour obtenir des résultats suffisamment précis, en peu de temps tout en respectant la condition CFL. Pour illustrer l'importance du choix de Δx et Δt j'ai simulé le potentiel de surface et la conductivité d'un polymère utilisé en environnement spatial (Kapton® HN – 1 mm) et irradié par un spectre représentatif de l'environnement géostationnaire en fonction du temps d'irradiation. Dans le premier cas (Figure 3.38, à gauche) les conditions CFL sont respectées et dans le deuxième cas elles ne le sont pas (Figure 3.38, à droite).

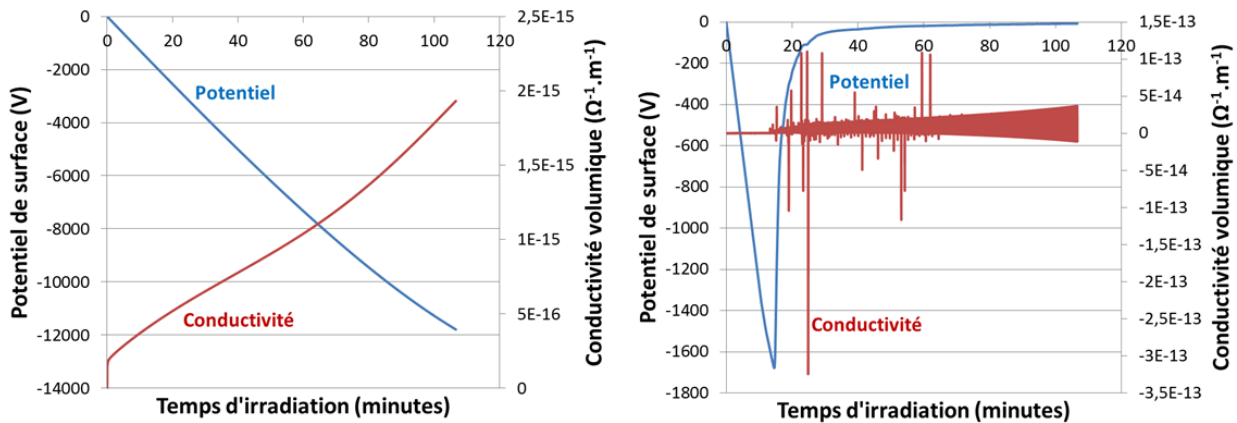


Figure 3.38 : La figure de gauche illustre les résultats de simulation du potentiel de surface et de la conductivité volumique du Kapton HN (1 mm) en fonction du temps d'irradiation pour un spectre représentatif de l'environnement géostationnaire, lorsque les conditions CFL sont respectées. La figure de droite illustre les mêmes résultats, lorsque les conditions CFL ne sont pas respectées.

Sur la Figure 3.38 de gauche, aucune oscillation n'est observée. Le comportement du potentiel de surface est normal et augmente linéairement en valeur absolue jusqu'à -12000 V sous l'effet de l'implantation des électrons incidents. La conductivité augmente à cause des électrons incidents qui génèrent des électrons et des trous libres en volume. Sur la Figure 3.38 de droite, le potentiel de surface augmente jusqu'à -1700 V puis diminue brusquement. La conductivité subit de fortes oscillations et prend des valeurs négatives ce qui n'est physiquement pas possible. Ces différences sont liées à de l'instabilité numérique puisque les conditions CFL ne sont pas respectées.

3.1.4 Diagramme fonctionnel de THEMIS

Pour illustrer le principe de fonctionnement de l'algorithme utilisé par THEMIS, son diagramme fonctionnel a été réalisé. Il est présenté ci-dessous. Ce diagramme présente, pour une itération temporelle donnée, chaque étape permettant de calculer les densités de charges, les niveaux de potentiel et les courants des charges, sur l'ensemble du volume du matériau, en fonction de l'irradiation et des propriétés électriques du matériau.

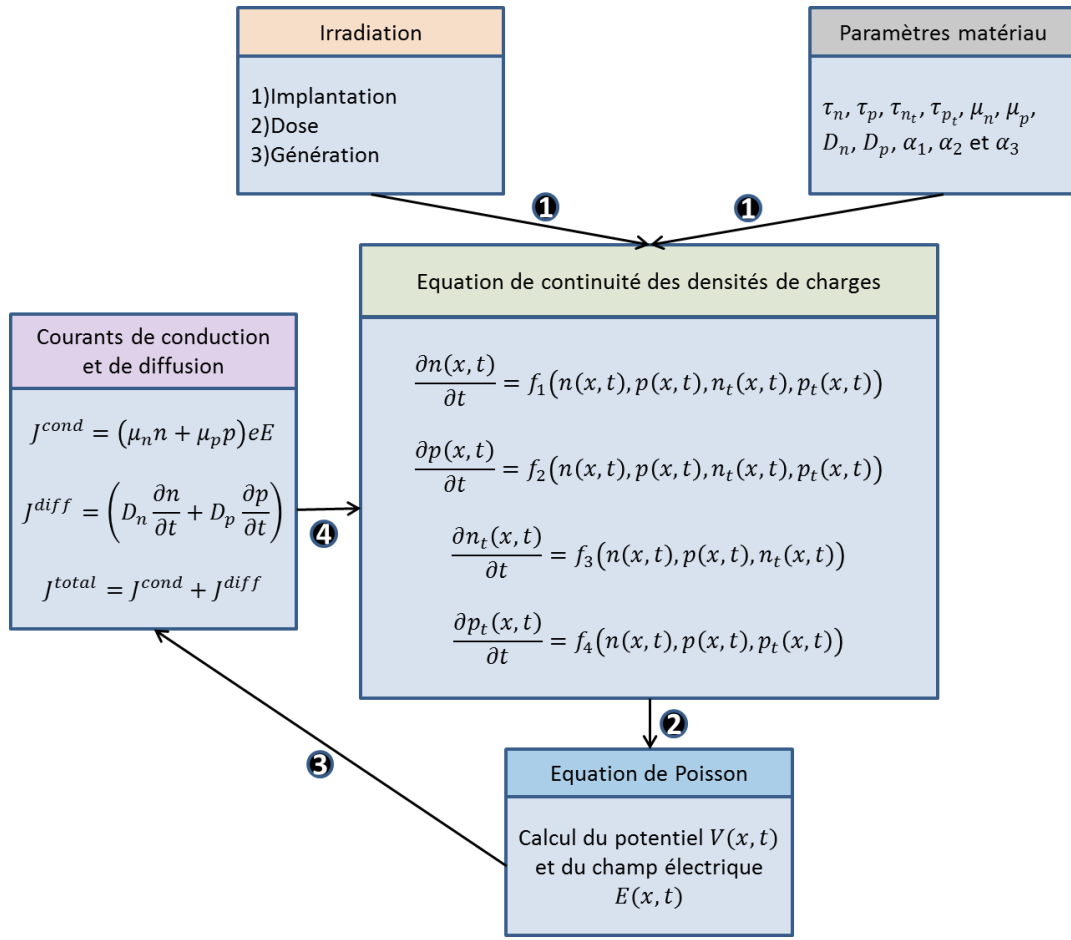


Figure 3.39 : Diagramme fonctionnel de THEMIS.

Lors de la première itération, l'implantation des électrons, la dose déposée et la génération de paires électron-trou sont calculées. Associées aux paramètres matériau, elles permettent de résoudre, sur l'ensemble du matériau (étape 1), les équations de continuité des densités de charges. Celles-ci permettent, en utilisant l'équation de Poisson et par connaissance des densités de charges, de déterminer le potentiel et le champ électrique (étape 2). Par connaissance des paramètres matériau, des niveaux de champ électrique et de densités de charges, il est possible de calculer les courants de conduction et de diffusion qui caractérisent le déplacement des charges (étape 3). Ceux-ci permettent de calculer à nouveau, en utilisant l'irradiation et les paramètres matériaux, de calculer les densités de charges par l'équation de continuité des densités de charges (étape 4).

3.2 Validation du modèle THEMIS à deux polymères utilisés en environnement spatial

Pour comprendre le comportement en charge des polymères en fonction du temps d'irradiation, il est nécessaire d'étudier les mécanismes qui gouvernent leurs évolutions. Ces

mécanismes sont liés à l'interaction électron-matière et au transport de charge dans les polymères. Pour les étudier, il existait le modèle RC présenté dans le chapitre 2, à l'aide duquel certains paramètres du modèle THEMIS ont déjà pu être approximés (temps de piégeage et de dé-piégeage des charges). La principale limite de ce modèle est sa dimensionnalité : l'implantation n'est prise en compte, les termes de dose et de génération sont uniformes en profondeur, les courants de convection (diffusion et conduction) et les gradients de densités de charges ne sont pas pris en compte. Ce modèle ne prend en compte aucune inhomogénéité.

Pour pallier à ceci, le modèle THEMIS, présenté dans le chapitre 2, a été construit. Les effets du champ électrique et de la température ne sont pas pris en compte dans ce chapitre, mais seront implémentés dans le modèle et présentés dans le chapitre 4. Le chapitre 3 a pour objectif principal de mettre en évidence l'intérêt de travailler avec un modèle 1D, plutôt que 0D. Les résultats de THEMIS sont comparés à différents résultats d'expériences (mesures de densités de charges, de potentiel et de conductivité), menées sur deux polymères fréquemment utilisés lors des missions spatiales (Téflon® FEP et Kapton® HN) et réalisées avant et pendant ce travail de doctorat. Les résultats du modèle sont analysés pour étudier l'interaction électron-polymère et le transport de charges de ces deux polymères. Ces expériences sont complémentaires et permettent, à l'aide du modèle THEMIS, de caractériser les propriétés électriques intrinsèques d'un matériau : temps de piégeage/dé-piégeage des charges, mobilité effective des charges, coefficients de recombinaison, etc. L'étude des paramètres en lien avec l'effet du champ électrique, tels que le rayon de thermalisation et le coefficient de Poole-Frenkel, sera faite dans le chapitre 4. Par connaissance de ces paramètres, il est possible de prédire et d'extrapoler le comportement en charge des polymères sous des environnements radiatifs variés. Cette partie se divise en 3 sections :

-Dans un 1^{er} temps, je décris les moyens d'irradiation et les protocoles expérimentaux mis en place à l'ONERA pour étudier l'interaction électron-matière et le transport de charges.

-Dans un 2^{ème} temps, les propriétés électriques du Téflon® FEP sont étudiées sur la base de deux expériences, dont les résultats sont comparés aux résultats de simulation de THEMIS. Ces expériences constituent une première validation du modèle THEMIS :

La première expérience consiste à irradier partiellement, en volume, le matériau avec des faisceaux successifs, mono-énergétiques et des énergies différentes. En utilisant la méthode *Pulsed-electroacoustic* sans contact (PEA, [2]), les profils volumiques de la densité totale nette de charges sont mesurés. Ces profils sont obtenus numériquement par le modèle THEMIS. Cette expérience permet de valider, par comparaison des données expérimentales aux données numériques, les modèles 1D de l'implantation des charges, de la dose déposée et de la génération de paires électron-trou de THEMIS. La méthode PEA ne permet pas de distinguer les

électrons et les trous, mais permet seulement de mesurer la charge nette totale. En utilisant THEMIS, il devient possible de prédire et de distinguer, d'un point de vue microscopique, la cinétique de déplacement des électrons et des trous, dans les parties irradiées et non irradiées du matériau. L'intérêt du modèle 1D est de montrer que, par implantation des électrons et par ionisation, l'inhomogénéité des charges génère un champ électrique qui les déplace, ce qui modifie de manière rétroactive leur cinétique de déplacement. Le modèle 1D permet aussi d'étudier les effets d'éventuels dipôles internes, créés par une répartition inhomogène des charges. L'ensemble de ces phénomènes ne peut être observable par un modèle 0D.

La *deuxième expérience* consiste à valider le modèle pour un cas représentatif des conditions de l'environnement spatial. Pour cela, le matériau est irradié avec un spectre continu dans le temps. Le potentiel de surface du matériau est mesuré avec une sonde Kelvin, puis comparé au potentiel de surface obtenu par le modèle THEMIS. Sur la base de ces comparaisons, il est possible de renforcer notre prédiction du comportement (piégeage/dépiégeage et recombinaison) et de la cinétique de déplacement (courants de convection) des électrons et des trous sous irradiation.

-Dans un 3^{ème} temps, le cas du Kapton® HN est étudié. Il s'agit d'un autre cas de validation, permettant de travailler avec un matériau différent du Téflon® FEP. Cela permet également de comparer les propriétés électriques de ces deux polymères, et de comprendre de quelle manière varie le transport de charges d'un polymère à l'autre.

3.2.1 Moyen d'irradiation et protocole expérimental

3.2.1.1 Moyen d'irradiation

Il existe à l'ONERA plusieurs moyens d'irradiations hautes énergies :

Le premier, nommé SIRENE [76], permet d'irradier les matériaux avec des spectres d'électrons, et de reproduire les conditions environnementales observées sur les différentes orbites : LEO, MEO et GEO [76]. Ce banc d'essai représente les conditions extrêmes d'irradiation, lors d'orages magnétiques intenses, où les matériaux se chargent intensément. Il s'agit de *pires cas*, où le risque d'occurrence de décharges électrostatiques est très important. Il utilise aussi des faisceaux mono-énergétiques pour réduire la complexité d'irradiation rencontrée avec les spectres en électrons. Dans le chapitre 4, nous verrons que l'utilisation de faisceaux mono-énergétiques de haute énergie permet de s'affranchir des effets de l'implantation des électrons, de ne considérer que la génération de paires électron-trou, ce qui facilite la détermination de certaines propriétés électriques des polymères.

Le deuxième, nommé GEODUR [76], permet d'étudier la charge interne et la charge de surface des satellites, sur différentes orbites. Tout comme SIRENE, ce banc d'essai peut aussi travailler

avec des faisceaux mono-énergétiques. Comme nous le verrons dans le chapitre 5, GEODUR est utilisé pour reproduire les conditions environnementales observées en orbite géostationnaire. Il sera décrit dans le chapitre 5.

- Enceinte SIRENE
 - Spectre SIRENE standard

L'enceinte SIRENE permet de travailler avec des faisceaux mono-énergétiques, dont les énergies s'étendent de quelques keV à plus de 400 keV. Pour représenter les conditions des différentes orbites, l'enceinte SIRENE utilise deux faisceaux mono-énergétiques. Le premier a une énergie de 20 keV, associé à un flux de 250 pA/cm², et le deuxième a une énergie de 400 keV, associé un flux de 50 pA/cm². Le faisceau de 400 keV passe à travers une feuille de diffusion complexe qui permet de le disperser en énergie. Superposés, les faisceaux 20 keV, et 400 keV dispersé, permettent de reproduire les spectres distribués rencontrés en environnement spatial. La Figure 3.40 illustre le spectre SIRENE standard et le spectre observé en orbite géostationnaire. Elle représente le flux intégré en pA/cm² en fonction de l'énergie des électrons incidents en keV.

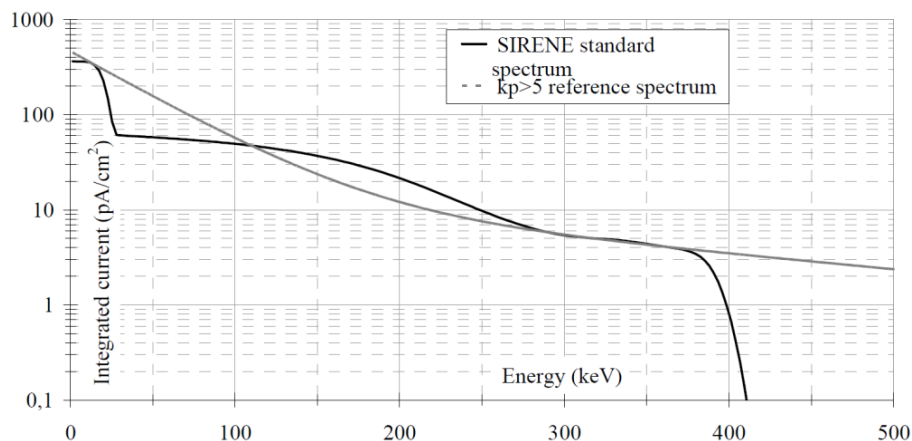


Figure 3.40 : Spectre SIRENE standard en noir. Spectre observé en orbite géostationnaire en gris.

- Tests spécifiques en conditions *double faisceau mono-énergétique*

La configuration *double faisceau mono-énergétique* superposés {[20 keV ; 250 pA/cm²] + [400 keV ; 50 pA/cm²]} est une méthode expérimentale qui permet de mettre en évidence les évolutions de conductivité dans le matériau et les mécanismes de transport d'un matériau ionisé. Le faisceau 20 keV permet de charger l'échantillon en surface, et le faisceau 400 keV permet de générer la conductivité induite sous irradiation. La configuration *double faisceau mono-énergétique* permet également une meilleure extraction des paramètres du modèle THEMIS, en comparaison à la configuration en spectre distribué, pour laquelle la distribution inhomogène de charges dans tout le volume rend la situation et l'extraction plus complexe. Dans la

configuration *double faisceau mono-énergétique*, la conductivité est homogène dans tout le volume, et son évolution avec la dose et le champ électrique est plus facile à étudier.

3.2.1.2 Protocole expérimental

- **Téflon® FEP :**

Irradiations successives : Un échantillon de Téflon® FEP, d'épaisseur 250 μm , métallisé sur l'une de ses faces, a été irradié pendant moins d'une heure, en utilisant l'enceinte SIRENE. 4 faisceaux mono-énergétiques, appliqués successivement, ont été utilisés. Un faisceau de 20 keV, de 125 keV, de 145 keV et de 165 keV. Tous ces faisceaux ont un flux de 100 pA/cm². Le faisceau 20 keV a été appliqué pendant 2.5 minutes, le faisceau 125 keV pendant 3 minutes, le faisceau 145 keV pendant 7 minutes et le faisceau 165 keV pendant 3 minutes. Entre chaque irradiation, l'échantillon est relaxé, c'est-à-dire laissé non-irradié pendant 10 minutes. Lors des irradiations, les profils de densités de charges ont été mesurés à l'aide de la méthode PEA sans contact [2]. Ce cas d'irradiation permet de mettre en évidence le transport en volume des électrons et des trous.

Irradiation continue : Un échantillon de Téflon® FEP, d'épaisseur 127 μm , métallisé face arrière, a été irradié pendant 10 000 secondes (environ 3 heures). Pour valider THEMIS, le spectre *double faisceau mono-énergétique* a été utilisé. Le potentiel de surface a été mesuré (Figure 3.49) à l'aide d'une sonde Kelvin. Dans cette configuration (Figure 3.41), le barycentre du plan de charges est proche de la surface. Cette irradiation permet d'étudier le comportement du Téflon® FEP dans des conditions proches de celles rencontrées en environnement spatial.

- **Kapton® HN :**

Un échantillon de Kapton® HN d'épaisseur 127 μm , métallisé face arrière, a été irradié pendant 10 000 secondes. Dans ce cas, le matériau est irradié avec le spectre SIRENE standard (Figure 3.40) et le potentiel de surface est mesuré à l'aide de la sonde Kelvin.

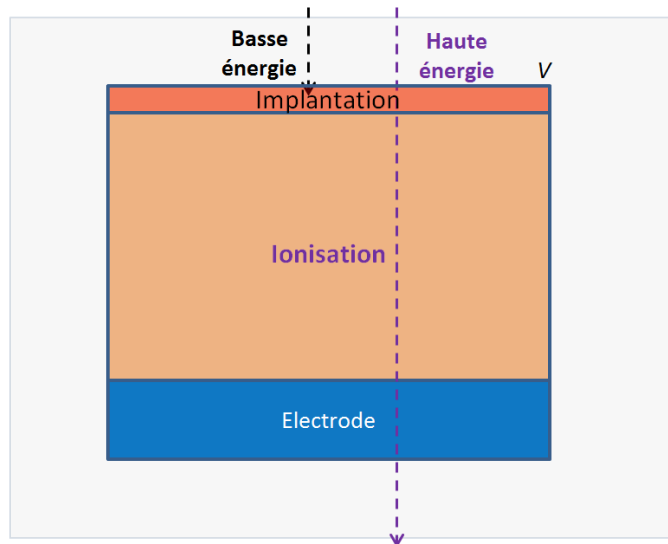


Figure 3.41 : Irradiation d'un polymère (en orange) avec deux faisceaux mono-énergétiques superposés. Le faisceau de basse énergie s'implante en surface et le faisceau de haute énergie est traversant.

3.2.2 Comportement du Téflon® FEP

3.2.2.1 Irradiations successives : analyse des densités de charges

Les irradiations successives présentées dans cette partie permettent de mettre en évidence l'avantage du modèle THEMIS sur le modèle RC. Elles permettent de visualiser le déplacement du barycentre du plan de charges, ce qui n'est pas possible avec le modèle RC. A l'aide de ces irradiations, il est possible d'extraire certains paramètres du modèle, tels que le produit Schubweg [77]–[79]. Ce produit caractérise la mobilité des charges, multipliée par leur temps de piégeage : $\mu \times \tau$. Il joue un rôle important dans le transport de charges, puisqu'il caractérise leur capacité à se déplacer plus ou moins loin, et plus ou moins rapidement.

3.2.2.1.1 Description des résultats : analyse des différences entre les données expérimentales et les résultats de THEMIS

La Figure 3.42 représente la densité totale de charges ρ , dans les cas expérimentaux (traits discontinus) et numériques (traits continus). Sur cette figure, le faisceau d'électrons pénètre par la gauche. L'abscisse 0 μm correspond à la jonction entre le vide et le polymère. A chaque irradiation, une zone de charges négative est créée, due à l'implantation d'électrons. Quand le matériau est irradié avec un faisceau de plus haute énergie, la zone de charges négative disparaît. Une nouvelle zone de charges négative apparaît, plus profonde en volume que la précédente: le barycentre du plan de charges se déplace dans le volume du matériau. Qualitativement, les résultats numériques et expérimentaux sont en bon accord. Cela signifie qu'on observe, dans les deux cas, un déplacement du barycentre du plan de charges. En revanche, l'abscisse et l'intensité pris par certains pics ne correspondent pas.

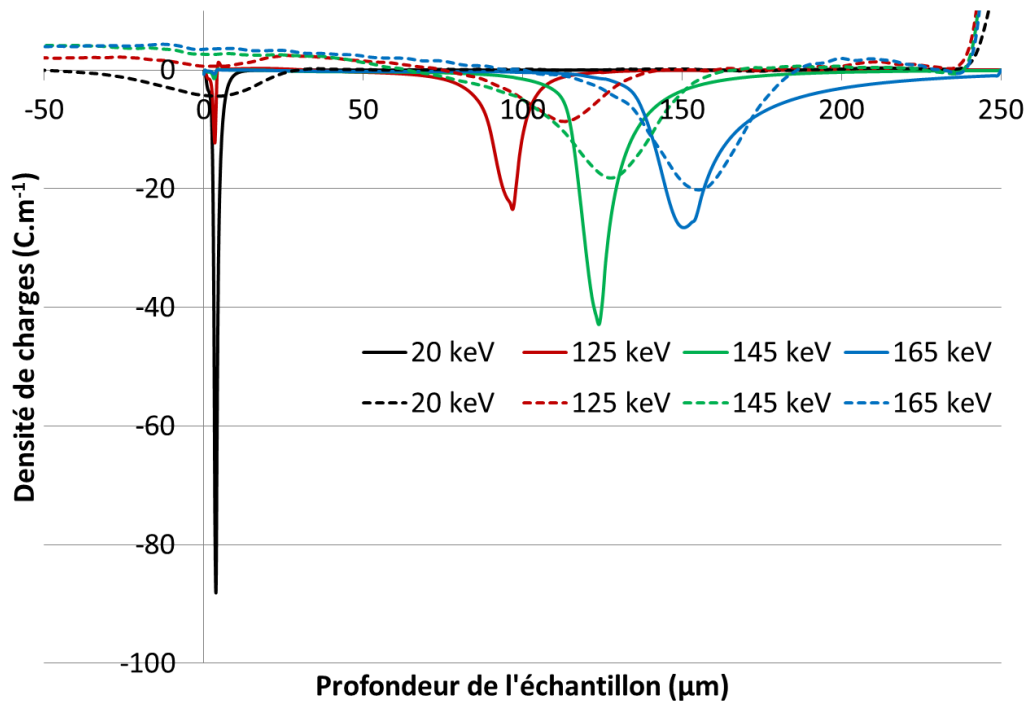


Figure 3.42 : Mesures PEA réalisées à l'ONERA (traits discontinus) et illustration de mesures PEA obtenues numériquement avec THEMIS (traits continus). En ordonnée est représentée la densité totale de charges et en abscisse la profondeur du matériau. Les mesures sont effectuées avec des rayonnements successifs d'énergies différentes. Un déplacement du pic de charges négatif est observé.

Faisceau 20 keV : Le pic du faisceau 20 keV du cas numérique a une intensité de -90 C/m, tandis que le pic du cas expérimental dépasse tout juste -5 C/m. La méthode PEA mesure des charges dans le vide, entre -50 μm et 0 μm, ce qui n'est physiquement pas possible. Cette méthode possède une résolution d'environ 20 μm, qui peut justifier en partie une telle différence. En effet, si la résolution était meilleure, il est très probable que le pic mesuré du 20 keV serait plus fin, et de plus grande intensité.

Faisceau 125 keV : Le faisceau 125 keV présente un meilleur accord entre les résultats expérimentaux et numériques, notamment du point de vue de l'intensité. Le pic numérique atteint -25 C/m et le pic expérimental -10 C/m. La position du pic numérique est 95 μm et celle du pic expérimental 115 μm. Les faisceaux mono-énergétiques générés dans l'enceinte SIRENE passent par une feuille de diffusion qui les disperse légèrement en énergie. Cette dispersion est estimée à 2 ou 3 keV, ce qui peut expliquer un léger étalement des pics expérimentaux. Une autre explication de cet étalement réside dans la présence d'électrons secondaires et rétrodiffusés par les parois de l'enceinte SIRENE. En effet, le faisceau mono-énergétique n'est pas parfaitement rectiligne. Il a une trajectoire légèrement courbée et une partie des électrons incidents n'impacte pas l'échantillon. Ils impactent les parois et ont assez d'énergie pour être rétrodiffusés ou générer des électrons secondaires qui se dirigent à nouveau vers l'échantillon. Ils s'implantent sur les côtés ou à l'arrière du matériau, avec un angle d'incidence aléatoire, ce qui peut expliquer en partie l'étalement du pic expérimental.

Faisceau 145 keV : L'accord entre les résultats expérimentaux et numériques pour le faisceau 145 keV sont meilleurs que pour le faisceau 125 keV. Le pic du faisceau 145 keV du cas numérique a comme abscisse 124 μm et celui du cas expérimental 127 μm . L'écart est très faible. La différence d'accord entre les faisceaux 145 keV et 125 keV peut se justifier par deux points :

→ Le calcul de l'implantation des électrons dans le matériau avec THEMIS. Les paramètres de cette équation (chapitre 2, partie 2.2.1, équation (2.2.1)) ont été ajustés pour être représentatifs des résultats de simulations Monte-Carlo (chapitre 2, partie 2.2.2). Nous avons vu dans cette partie que l'accord entre les résultats des équations analytiques et de type Monte-Carlo est bon lorsqu'il s'agit d'un spectre avec plusieurs énergies. Dans le cas de faisceaux mono-énergétiques, l'accord diminue. Les paramètres de l'équation (2.2.1) du chapitre 2 ont été ajustés pour quelques énergies seulement, car il n'était pas possible de les ajuster parfaitement pour un grand nombre d'énergies. Ces raisons peuvent en partie expliquer les déviations de la position du pic en fonction de l'énergie du faisceau.

→ Dans le chapitre 2 (partie 2.2.2), j'ai décrit l'existence d'une légère incohérence entre les équations d'implantation des électrons et de génération de paires électron-trou, qui peut expliquer en partie les écarts entre résultats expérimentaux et numériques. Au-delà du parcours extrapolé, des électrons sont implantés, mais la création de paires électron-trou est nulle. Dans le cas de simulations Monte-Carlo, ce n'est pas le cas, ce qui signifie qu'il y a plus de conductivité induite sous irradiation que dans le cas d'équations déterministes. Si la cohérence était respectée, on peut supposer que l'intensité des pics obtenue numériquement serait plus faible, donc plus représentative des résultats expérimentaux.

Faisceau 165 keV : Le faisceau 165 keV du cas numérique présente un très bon accord, d'un point de vue intensité et position du pic, avec le cas expérimental. En revanche, il paraît plus pertinent de comparer l'intensité entre les pics 145 keV et 165 keV, dans les cas expérimentaux et numériques. Le faisceau 145 keV, qui a été appliqué pendant presque deux fois plus de temps que le faisceau 165 keV, a implanté presque deux fois plus d'électrons en volume. Cela signifie que la densité de charges mesurée, associée au faisceau 145 keV, est censée être plus importante que celle mesurée pour le faisceau 165 keV. Ce n'est pas le cas des résultats expérimentaux, alors que les résultats numériques reproduisent ce comportement attendu. Ceci conforte le fait que la méthode PEA est peu précise. En effet, de la même manière que pour les faisceaux 20 keV, 125 keV et 145 keV, des charges positives sont observées dans le vide, entre -50 μm et 0 μm , ce qui n'est pas possible.

Les origines des différences entre résultats expérimentaux et numériques sont synthétisées :

D'origine expérimentale : a) La résolution de la méthode PEA n'est que de 20 μm : des charges sont mesurées dans le vide. b) La feuille de diffusion génère des faisceaux dispersés, qui peuvent expliquer un léger étalement des mesures expérimentales. c) Le faisceau incident n'est pas parfaitement rectiligne. Il génère des électrons secondaires ou rétrodiffusés, en provenance des parois de l'enceinte, qui n'impactent pas nécessairement le matériau sur sa face avant, mais à un endroit quelconque, avec un angle d'incidence aléatoire. Cela peut expliquer un plus grand étalement des mesures expérimentales.

D'origine numérique : a) Il existe une légère incohérence entre le calcul de l'implantation des électrons et la génération de paires électron-trou. b) Les paramètres de l'équation d'implantation ne peuvent pas être parfaitement ajustés pour un grand nombre d'énergies. Il résulte que certaines énergies sont moins bien représentées. Cette erreur se propage au calcul de la génération de paires électron-trou, ce qui suggère qu'il serait préférable d'utiliser des simulations Monte-Carlo.

Malgré les sources d'erreurs possibles qui expliquent les différences entre résultats numériques et expérimentaux, l'accord général reste bon. L'intensité des pics est relativement bien représentée et la cinétique est en bon accord. Cela permet d'expliquer le comportement général des charges dans le Téflon® FEP sous irradiation, en utilisant le modèle THEMIS. Dans la partie 3.2.2.1.2, je décris les évolutions des profils de densité de charges des résultats expérimentaux sur la base des résultats numériques.

3.2.2.1.2 Analyse du comportement des charges dans le Téflon® FEP sur la base des résultats numériques de THEMIS

- Explications sur la base des résultats du modèle THEMIS

A) Sous l'influence du faisceau 20 keV, des électrons s'implantent en surface (pic noir, trait continu, Figure 3.42). Les électrons implantés et générés par ionisation (Figure 3.43) sont mobiles, mais ont un temps de piégeage très court (quelques secondes). Ceci a déjà été montré lors de précédentes expériences menées à l'ONERA [7]. Lorsque le faisceau 20 keV est arrêté, le pic de charges négatif persiste, car le dé-piégeage des électrons est quasiment nul. La Figure 3.44 représente le nombre d'électrons libres en fonction de la profondeur du matériau. La courbe bleue représente le nombre d'électrons libres, 150 secondes après le début de l'irradiation, juste avant d'arrêter le faisceau. La courbe rouge représente le nombre d'électrons libres, quelques secondes après l'arrêt du faisceau 20 keV. On constate qu'à l'arrêt du faisceau, le nombre d'électrons libres chute brutalement. Ces derniers sont piégés de manière instantanée, permanente et restent en surface.

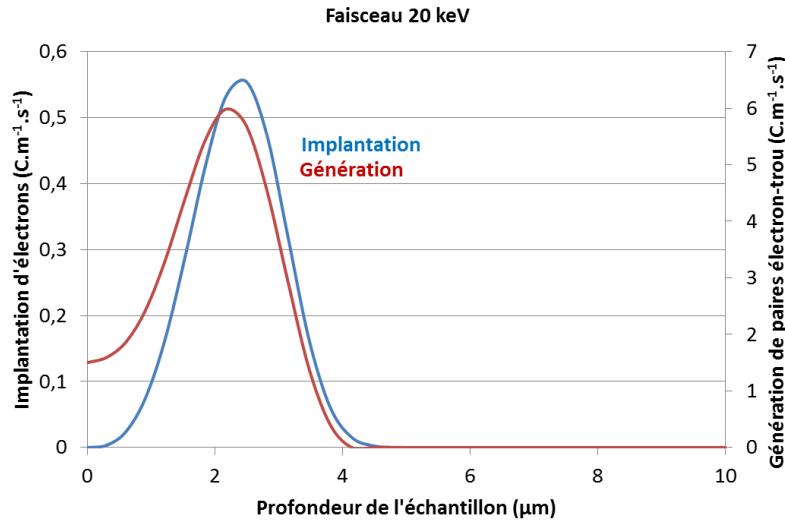


Figure 3.43 : Profils d'implantation d'électrons et de génération de paires électron-trou, en 1D, dans la profondeur du matériau, pour le faisceau 20 keV.

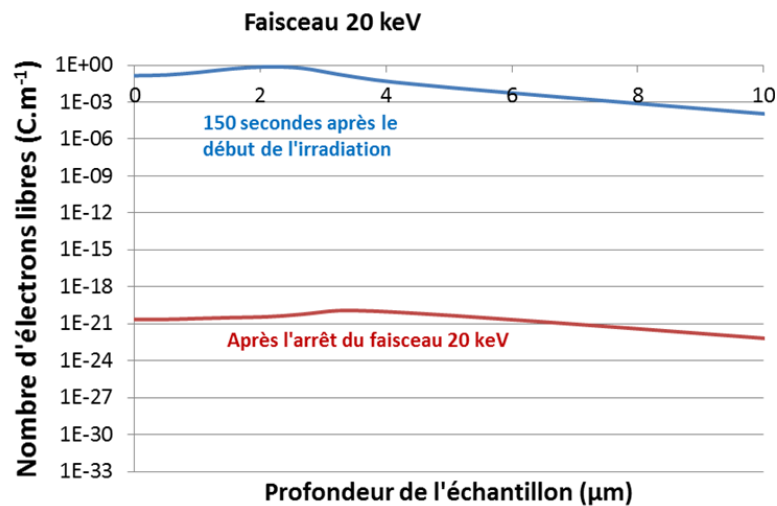


Figure 3.44 : Nombre d'électrons libres en fonction de la profondeur de l'échantillon à proximité de la surface. La courbe bleue représente le nombre d'électrons libres après 150 secondes d'irradiation. La courbe rouge représente le nombre d'électrons libres à l'arrêt du faisceau 20 keV.

B) Lorsque le Téflon® FEP est irradié par le faisceau 125 keV, on constate que le pic noir réduit en intensité et qu'un nouveau pic de charges (trait continu rouge) apparaît. Le pic de charges rouge (situé à 90 μm) est lié aux actions combinées de l'implantation des électrons d'énergie 125 keV, de l'ionisation du volume et du champ électrique. L'implantation est représentée sur la Figure 3.45 en fonction de la profondeur de l'échantillon. Une grande partie des électrons est implantée autour d'un pic situé à 60 μm . Un grand nombre d'électrons est également implanté avant (de 20 μm à 60 μm) et après (de 60 μm à 100 μm). La partie des électrons implantée après 60 μm contribue à établir le pic rouge observé sur la Figure 3.42, situé à 90 μm .

Création du champ électrique :

Le champ électrique est induit par l'implantation des électrons du faisceau 20 keV, puis du faisceau 125 keV. Les électrons 20 keV sont implantés en surface, à 3 micromètres de la surface (Figure 3.43). Le barycentre de charges est en surface et le champ électrique est constant dans l'ensemble du volume. Ce champ électrique est représenté en fonction de la profondeur du matériau, sur la Figure 3.46, par la courbe noire. Lorsque le faisceau 20 keV est arrêté et que le faisceau 125 keV est initié, la configuration du champ électrique change. Les électrons sont implantés autour d'un pic situé à 60 μm , répartis environ 40 μm avant et après. Le champ électrique créé par ces électrons est constant de 100 μm jusqu'à 250 μm et vaut $1,8 \times 10^7$ V/m (Figure 3.46). Il est plus grand que le champ électrique créé par le faisceau 20 keV (8×10^6 V/m), car les électrons sont implantés plus proche de la masse, située sur la face arrière de l'échantillon, à 250 μm . Entre 0 μm et 70 μm , il est un ordre de grandeur plus bas : 2×10^6 V/m. Entre 70 μm et 100 μm il augmente très rapidement. Cette configuration spécifique est liée au déplacement des trous du volume vers la surface. Les trous, générés en volume par ionisation, se déplacent sous l'effet du champ électrique en direction de la surface. Ils écrantent le potentiel électrostatique créé par les électrons implantés du faisceau 20 keV. Ils se recombinent aussi avec les électrons, ce qui diminue le champ électrique.

Action combinée de la génération de trous et du champ électrique :

Sous irradiation, le faisceau 125 keV génère des paires électron-trou en volume (Figure 3.45). Sous l'effet du champ électrique, les trous se déplacent en surface. Sous l'influence combinée de la génération de paires électron-trou du faisceau 125 keV (représentée sur la Figure 3.45) et du champ électrique, les trous générés en volume se déplacent en direction de la surface. En s'éloignant vers la surface, les trous générés autour de la position 90 μm créés un déficit de charges positives, donc un excédent de charges négatives, qui correspond au pic rouge observé sur la Figure 3.42. Un peu plus proche de la surface, par exemple autour de 50 μm , les trous générés ne créent presque pas de déficit de charges positives car ils se déplacent très peu. Le champ électrique dans cette partie du matériau est beaucoup plus faible. Cette expérience renseigne que les trous sont, contrairement aux électrons, des charges qui se déplacent sur de longues périodes de temps, ce qui signifie qu'ils possèdent un temps de piégeage plus long. Ce temps sera confirmé par les irradiations continues. La diminution en intensité du pic noir résulte du déplacement en surface, sous l'influence du champ électrique, des trous libres générés en volume, par ionisation, par le faisceau 125 keV.

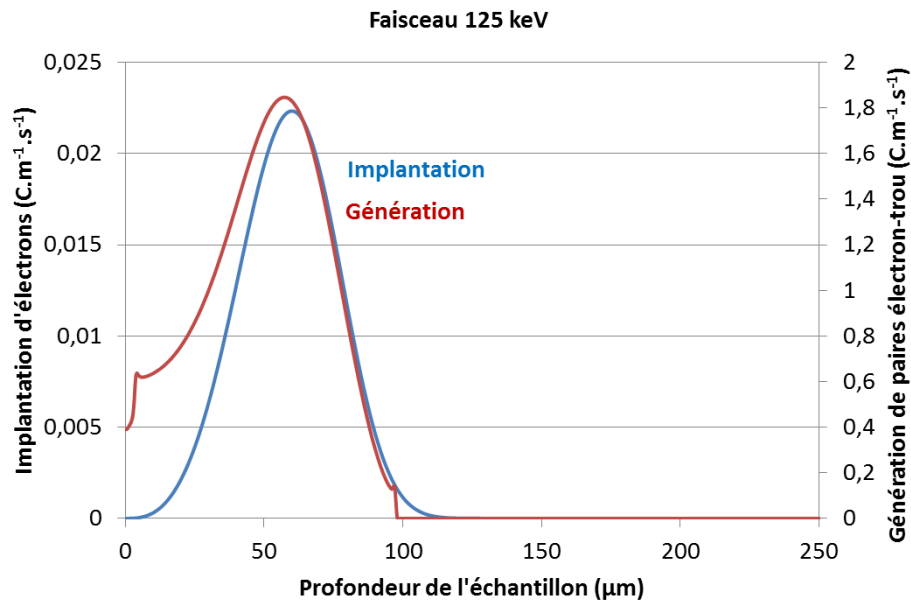


Figure 3.45 : Profils d'implantation d'électrons et de génération de paires électron-trou, en 1D, dans la profondeur du matériau, pour le faisceau 125 keV.

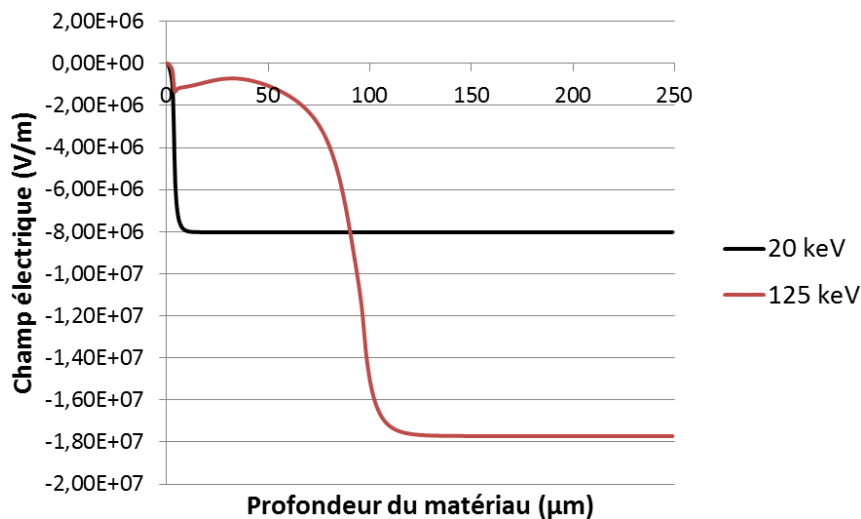


Figure 3.46 : Profil du champ électrique, en 1D, en fonction de la profondeur de l'échantillon pour les faisceaux 20 keV et 125 keV.

Pour résumer, les trous générés par le faisceau 125 keV se déplacent en surface par des phénomènes de conduction, liés à la présence de l'effet du champ électrique, d'abord créé par le faisceau 20 keV, puis 125 keV. Ce phénomène est illustré sur la Figure 3.47, mais une explication plus approfondie est faite dans le paragraphe C) pour les faisceaux 125 keV et 145 keV. En se déplaçant, les trous se recombinent avec les électrons et/ou écrantent leur potentiel électrostatique. Ces 3 mécanismes (génération, conduction et recombinaison) expliquent la diminution du champ électrique et la diminution du pic de la densité totale de charges en surface (Figure 3.42). Ils sont également responsables d'une partie des phénomènes qui expliquent la conductivité induite par les radiations (RIC). D'autres mécanismes responsables de cette RIC

seront présentés dans la suite de ce chapitre (piégeage des trous) et dans le chapitre 4 (effet du champ électrique sur la génération de paires électron-trou et la conduction des charges).

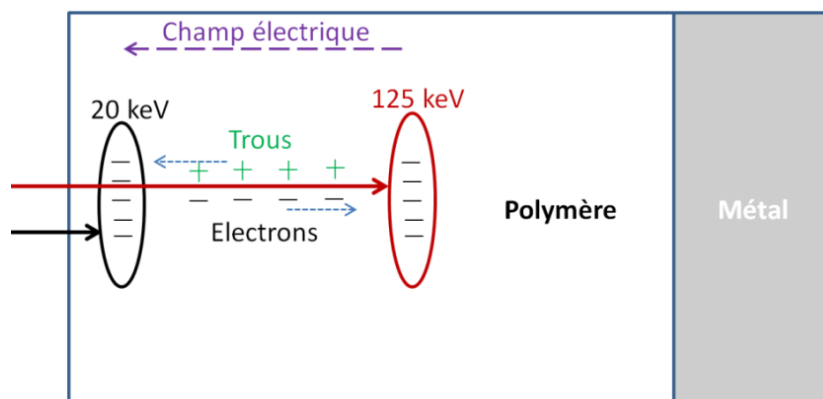


Figure 3.47 : Illustration du déplacement (flèches bleues en pointillé) des charges sous l'effet du champ électrique. Les trous vont dans le sens du champ électrique et les électrons dans le sens opposé.

C) Les phénomènes physiques liés à la disparition du pic de charges du faisceau 20 keV, sous l'influence du faisceau 125 keV, sont identiques pour la disparition du pic de charges du faisceau 125 keV, sous l'influence du faisceau 145 keV. Pour illustrer la disparition du pic de charges créé par le faisceau 125 keV, sa densité totale de charges et l'accumulation/déplétion des trous, relative au faisceau 145 keV, sont représentées sur la Figure 3.48. L'accumulation/déplétion des trous sont représentatifs de leur déplacement. Lorsqu'elle est positive, les trous s'accumulent. Lorsqu'elle est négative, il y a un déficit de trous, donc un excédent de charges négatives. Cette figure montre que, sous l'influence du champ électrique créé par implantation, les trous se déplacent en direction de la surface. Ils parcourent quelques micromètres en quelques minutes et écrantent le pic de charges négatives créé par le faisceau 125 keV. Pour reproduire la cinétique de déplacement des trous, leur mobilité μ et leur temps de piégeage τ ont été ajustés manuellement en utilisant le modèle THEMIS. Ces derniers ont une faible mobilité et un temps de piégeage long. Le temps de piégeage τ et la mobilité μ sont déterminés en utilisant l'irradiation continue, qui est présentée dans la partie suivante.

D) Pour les faisceaux 145 keV et 165 keV, les explications sont identiques.

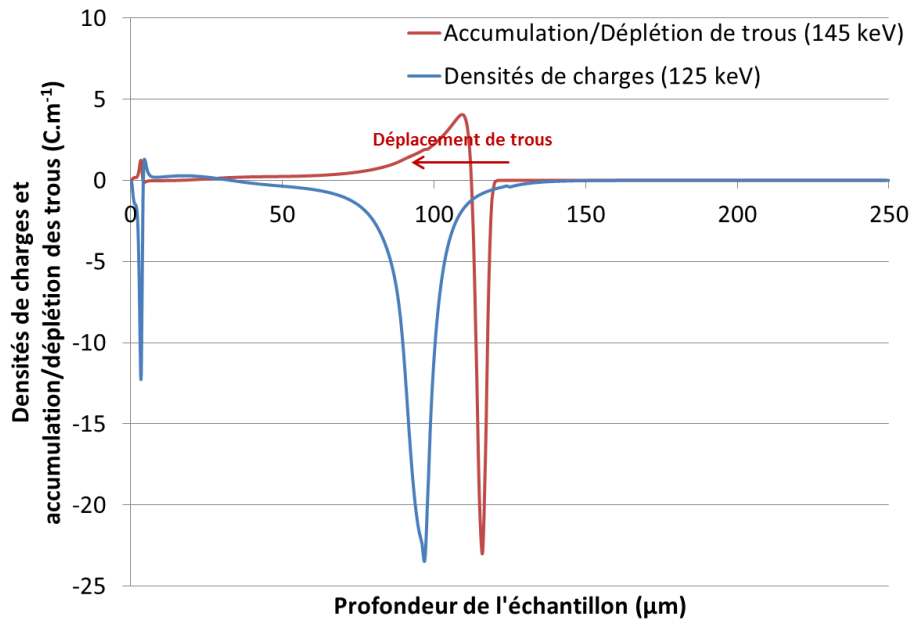


Figure 3.48 : Densités totales de charges en fonction de la profondeur de l'échantillon pour le faisceau 125 keV (courbe bleue). Accumulation/déplétion de trous (courbe rouge) correspondant au faisceau 145 keV. Les valeurs de l'accumulation/déplétion des trous ont été multipliées par 4000, pour faciliter la lecture des courbes.

En conclusion de cette partie, nous venons de voir qu'en tenant compte des sources d'erreur expérimentales et numériques, le modèle THEMIS montre tout de même une bonne reproductibilité de l'expérience présentée. Le déplacement du barycentre du plan de charges est correctement décrit par THEMIS avec l'augmentation de l'énergie du faisceau. La prise en compte de l'inhomogénéité des charges et du champ électrique par THEMIS n'aurait pas été possible avec le modèle RC. Cette prise en compte permet d'être correctement représentatif des phénomènes physiques qui gouvernent la RIC du Téflon® FEP : piégeage rapide des électrons, dé-piégeage quasiment infini et piégeage lent et faible mobilité des trous. Ces propriétés matériau seront confirmées par l'expérience suivante, en irradiation continue, avec une analyse de l'évolution du potentiel de surface. L'irradiation est effectuée en condition *double faisceau mono-énergétique*, ce qui permet d'étudier le comportement en charge du Téflon® FEP pour un cas proche des conditions spatiales.

3.2.2.2 Irradiations continues : analyse du potentiel de surface

Un échantillon de Téflon® FEP, d'épaisseur 127 μm , métallisé face arrière, a été irradié pendant 10 000 secondes (environ 3 heures). Pour valider THEMIS, le spectre *double faisceau mono-énergétique* a été utilisé. Le potentiel de surface a été mesuré (Figure 3.49) à l'aide d'une sonde Kelvin. Dans cette configuration (Figure 3.41), le barycentre du plan de charges est proche de la surface. Cette irradiation permet d'étudier le comportement du Téflon® FEP dans des conditions proches de celles rencontrées en environnement spatial.

3.2.2.2.1 Description des résultats : analyse des différences entre les données expérimentales et les résultats de THEMIS

La Figure 3.49 décrit l'évolution du potentiel de surface du Téflon® FEP, d'épaisseur 127 μm , irradié pendant 3 heures avec un faisceau de basse énergie 20 keV et un faisceau de haute énergie 400 keV. La courbe rouge correspond aux résultats expérimentaux et la courbe bleue aux résultats numériques. Sur chacune des courbes, on distingue 3 phases : la *première phase*, où le potentiel de surface croît en valeur absolue, la *deuxième phase*, où il diminue en valeur absolue et la *troisième phase*, où il augmente à nouveau en valeur absolue. L'évolution temporelle du potentiel de surface calculée par THEMIS est en bon accord avec les données expérimentales réalisées dans l'enceinte SIRENE. Sur cette même figure, l'écart relatif entre les résultats numériques et expérimentaux est représenté. Excepté sur les premières secondes d'irradiation, l'écart relatif est en moyenne de 10%. Ce bon accord résulte d'un jeu de paramètres (temps de piégeage, dé-piégeage des charges, mobilités des charges et coefficients de recombinaison) représentatif du comportement des charges dans le Téflon® FEP sous irradiation. Pour ces raisons, j'expliquerai l'évolution temporelle du potentiel de surface expérimental sur la base des résultats du modèle THEMIS.

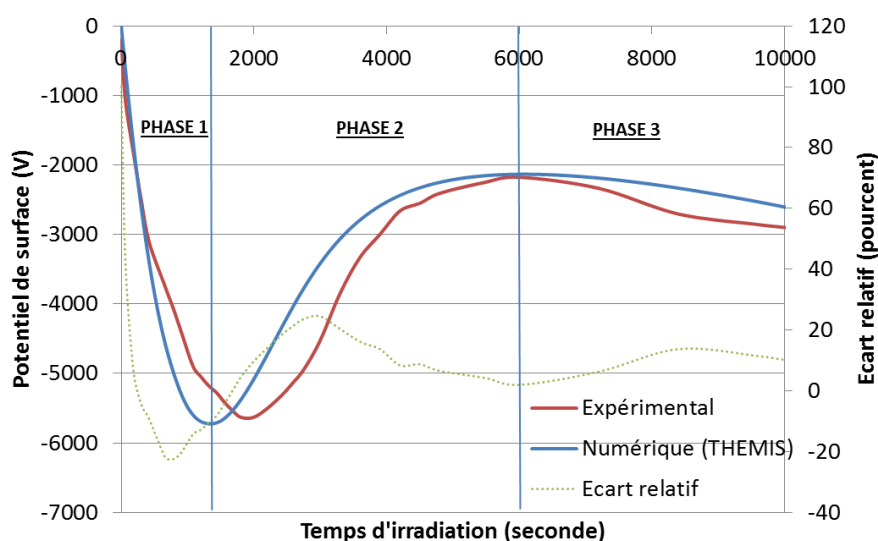


Figure 3.49 : Potentiel de surface expérimental et numérique en fonction du temps d'irradiation dans le cas d'une irradiation électronique de type *double faisceau mono-énergétique* : [20 keV – 250pA/cm²] + [400 keV – 50pA/cm²] sur un échantillon de Téflon® FEP de 127 μm d'épaisseur.

Il existe cependant quelques différences entre les résultats expérimentaux et les résultats numériques. Par exemple, les coordonnées représentatives du passage de la phase 1 à la phase 2 ne sont pas parfaitement identiques entre les expériences et THEMIS. Dans le cas numérique, le potentiel maximum est atteint après 1500 secondes alors que dans le cas expérimental, il est atteint autour de 2000 secondes. L'accroissement du potentiel est identique en phase 2, mais l'écart relatif atteint presque 20%. La différence peut s'expliquer par certains processus physiques qui ne sont pas correctement pris en compte. Par exemple, le modèle THEMIS

n'utilise aucun modèle pour simuler le repoussement des électrons incidents par effet électrostatique (charge de surface) et pour simuler l'émission électronique secondaire à l'interface vide/diélectrique. Pour approcher ces effets et essayer d'en être le plus représentatif possible, le flux du faisceau 20 keV utilisé dans les simulations est diminué. Il vaut 150 pA/cm², contre 250 pA/cm² dans les expériences.

Pour chacune des phases, les évolutions temporelles du potentiel de surface sont analysées au regard des variations de densité des électrons et des trous dans le volume du matériau, sur la base des résultats du modèle THEMIS. La charge totale ρ est d'abord étudiée, puis le comportement des électrons, et enfin celui des trous. La charge totale ρ permet d'expliquer les évolutions globales du potentiel de surface. L'étude du comportement des électrons et des trous permet de comprendre plus en détail le transport des charges, la conductivité, et donc les évolutions de potentiel. Dans la suite, je ferai référence au potentiel de surface par la notation V_s .

3.2.2.2.2 Analyse du comportement des charges dans le Téflon® FEP sur la base des résultats numériques de THEMIS

3.2.2.2.2.1 1^{ère} phase du potentiel de surface

- Charge totale ρ

Lors de la première phase, V_s augmente jusqu'à 1500 secondes. V_s dépend de la charge totale dans le matériau. Chacune des charges (électrons et trous) influe sur le potentiel d'après la loi de Poisson. Pour étudier l'évolution temporelle de V_s , un bilan de charges est effectué. La variation temporelle de la densité totale de charges $\partial\rho/\partial t$ est calculée :

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}(x, t) = -\frac{\partial n}{\partial t}(x, t) - \frac{\partial n_t}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial p}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial p_t}{\partial t}(x, t) \quad (3.2.2.2.2.1)$$

Dans le matériau, pour une maille et un instant donnés, $\partial\rho/\partial t$ traduit si cette maille se charge négativement ou positivement. $\partial\rho/\partial t$ a été tracé sur la Figure 3.50, pour trois temps différents, chacun représentatif d'une phase : 200 secondes (phase 1), 3000 secondes (phase 2) et 7500 secondes (phase 3) après le début de l'irradiation. Les valeurs à 7500 secondes sont multipliées par 10 pour être observables sur la figure. On constate que $\partial\rho/\partial t$ est globalement négative à 200 secondes, ce qui explique que V_s augmente en phase 1. Pour confirmer cela, l'intégrale dans l'espace de $\partial\rho/\partial t$, notée $\int_{0\mu m}^{127\mu m} \frac{\partial\rho}{\partial t} dx$, a été tracée sur la Figure 3.51 pour différents temps d'irradiation, pour chaque phase. Cette intégrale est toujours négative pendant la première phase, confirmant que V_s augmente. Elle est de moins en moins négative en fonction du temps d'irradiation et devient légèrement positive à 1500 secondes. Cela signifie que la cinétique de

charge diminue, ce qui traduit un apport de plus en plus important de trous par conduction, en provenance du volume, sous l'effet de l'ionisation et du champ électrique. A partir de 1500 secondes, le potentiel cesse d'augmenter et commence à diminuer. Les mécanismes physiques responsables de ces évolutions sont détaillés ci-après.

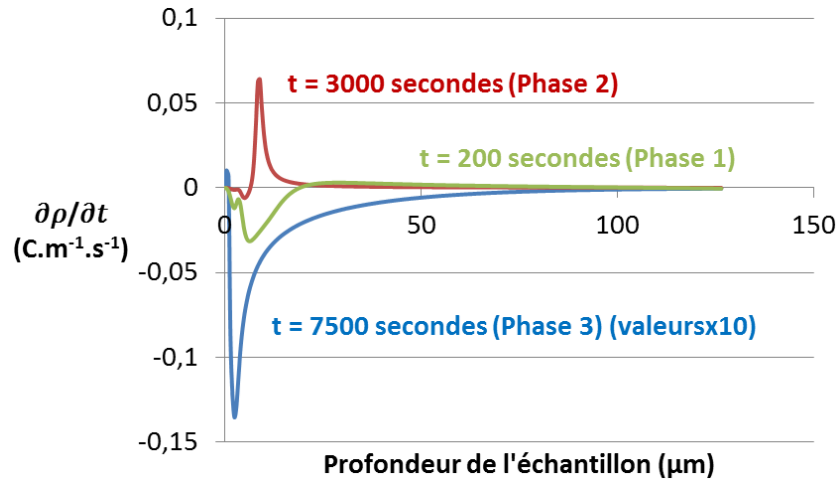


Figure 3.50 : Evolution temporelle de la densité totale de charges pour un temps donné, $t=200$ secondes, en fonction de la profondeur du matériau.

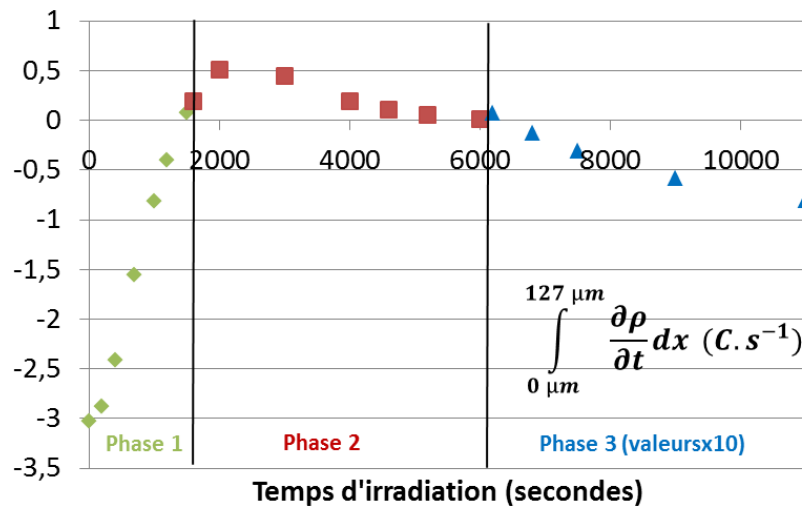


Figure 3.51 : Intégrale de la densité totale de charge sur l'ensemble du matériau. Les résultats sont affichés pour plusieurs temps différents.

- Electrons

Nous voyons sur la Figure 3.50 que l'intégrale de $\partial\rho/\partial t$ est significativement négative sur les 10 premiers micromètres. Dans cette zone, cela signifie que l'apport d'électrons est plus important que celui des trous. Cela peut également signifier que la déplétion d'électrons est moins importante que celle des trous. La Figure 3.52 représente l'accumulation/déplétion d'électrons en fonction de la profondeur de l'échantillon, pour un temps d'irradiation donné : 200 secondes. Sous l'effet du faisceau 20 keV, le matériau se charge en surface : un champ

électrique se crée. Sous son influence, les électrons implantés en surface (pic négatif) sont transportés en volume (pic positif). On constate sur cette figure que les électrons se déplacent sur de très courtes distances, inférieures à 5 micromètres. Ce déplacement dépend du produit Schubweg [77]–[79], qui dépend du produit $\tau \times \mu$. Nous avons noté que la valeur de ce produit conditionne la pente à l'origine de l'évolution temporelle du potentiel de surface (Figure 3.49). Pour les électrons, τ est très faible (de l'ordre de la seconde), ce qui a été mis en évidence expérimentalement [8], puis confirmé par les résultats du modèle THEMIS. Pour obtenir la bonne pente, leur mobilité μ a été ajustée manuellement. Le produit Schubweg des électrons est significativement plus petit que celui des trous : comme je l'expliquerai dans la phase 2, ces derniers ont un temps de piégeage long et une mobilité légèrement plus faible que les électrons. Les électrons sont, en comparaison des trous, des charges peu mobiles. Ce comportement est principalement gouverné par leur temps de piégeage très rapide, plusieurs ordres de grandeur inférieur aux trous, et également par leur temps de dé-piégeage quasi-infini sur l'échelle de vie du satellite. Les électrons générés en surface par le faisceau 20 keV sont piégés de manière permanente, proche de la surface, sur les premiers microns. La Figure 3.53 illustre ce phénomène et représente le nombre d'électrons libres en fonction du temps d'irradiation et de la profondeur du matériau. Le pic caractéristique des premiers micromètres est lié au faisceau 20 keV. Ce nombre sature rapidement à cause du piégeage.

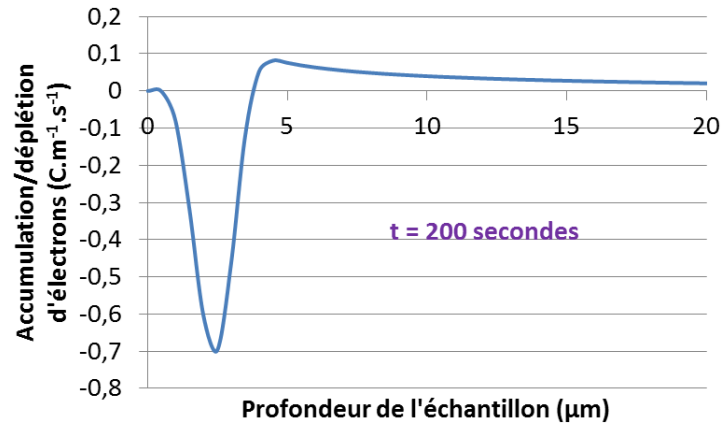


Figure 3.52 : Accumulation/déplétion d'électrons à $t=200$ secondes, en fonction de la profondeur du matériau.

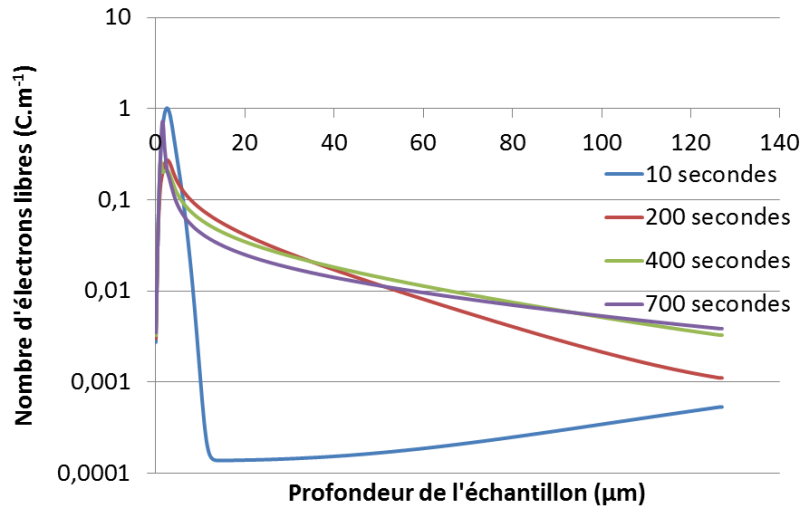


Figure 3.53 : Nombre d'électrons libres en fonction de la profondeur de l'échantillon pour différents temps d'irradiation.

- Trous

L'explication des évolutions temporelles du potentiel de surface observées sur la Figure 3.49 ne peut pas s'expliquer uniquement par le comportement des électrons. Ces derniers sont des charges stables et ne participent qu'à l'augmentation du potentiel de surface. Pour expliquer l'arrêt progressif de l'augmentation du potentiel de surface en phase 1, il est nécessaire d'étudier le comportement des trous. Nous attribuons le comportement du potentiel de surface à la frontière entre la phase 1 et la phase 2, à un apport de trous de plus en plus important en surface. Le potentiel de surface créé par l'implantation des électrons est de plus en plus écranté par le déplacement de trous. Cet apport est lié à l'augmentation des courants de conduction des trous : $J_p^{conduction} = p\mu_p E$. Ce courant dépend de la densité de trous libres, de leur mobilité et du champ électrique. A mobilité constante, l'augmentation de la conduction des trous vient de l'augmentation croissante du champ électrique et de l'augmentation croissante de la densité de trous libres. L'augmentation croissante du champ électrique est due à l'implantation continue d'électrons en surface lors de la 1^{ère} phase. Ce comportement est représenté sur la Figure 3.54. L'augmentation croissante de la densité de trous libres est attribuée à un long temps caractéristique de piégeage des trous, dont l'ordre de grandeur approche la dizaine de millier de secondes, ce qui sera confirmé pendant la phase 2. Sous l'effet du faisceau 400 keV, le nombre de trous libres générés en volume augmente de manière croissante. Le pic de surface est lié au faisceau 20 keV. Ce comportement est illustré par THEMIS sur la Figure 3.55. Il en résulte une augmentation du courant de conduction des trous, illustrée sur la Figure 3.56, et une accumulation du nombre de trous en surface, illustrée par la Figure 3.57. En surface, les trous écrantent le potentiel électrostatique créé par les électrons implantés et se recombinent avec ces derniers. Le phénomène de recombinaison est illustré par la Figure 3.58 et représente le taux de recombinaison entre les trous libres et les électrons piégés. La mobilité des trous est ensuite

ajustée manuellement pour faire correspondre les évolutions temporelles du potentiel de surface numériques et expérimentales.

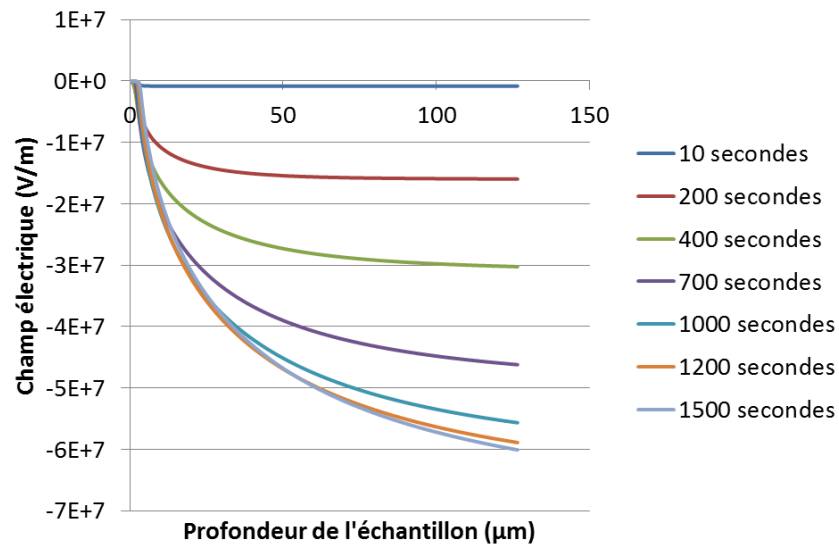


Figure 3.54 : Champ électrique en fonction de la profondeur du matériau pour différents temps d'irradiation.

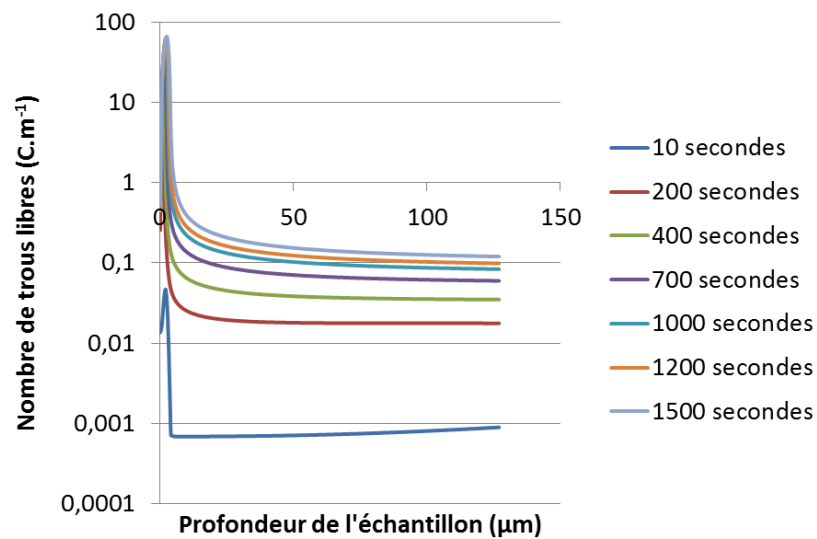


Figure 3.55 : Nombre de trous libres en fonction de la profondeur du matériau et du temps d'irradiation.

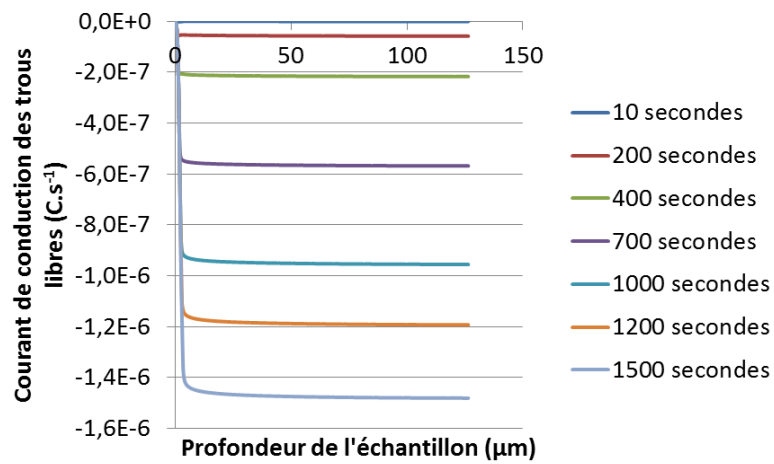


Figure 3.56 : Courant de conduction des trous libres en fonction de la profondeur du matériau et du temps d'irradiation.

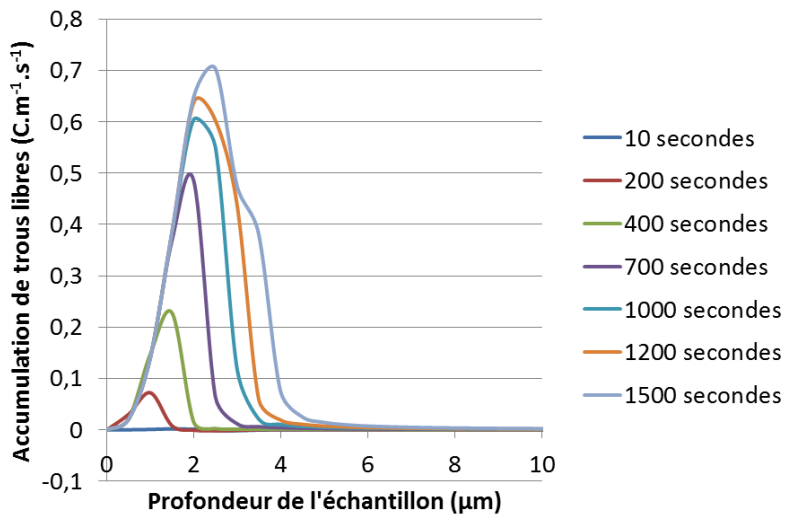


Figure 3.57 : Accumulation de trous libres en surface, en fonction de la profondeur de l'échantillon et du temps d'irradiation.

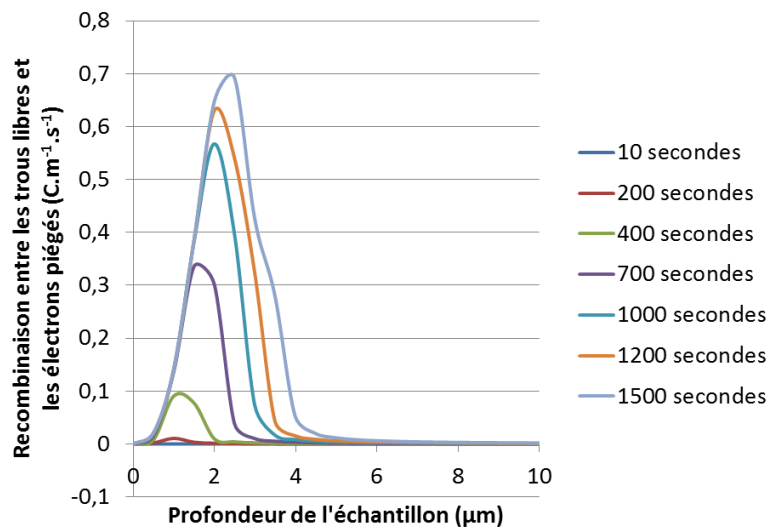


Figure 3.58 : Recombinaison entre les trous libres et les électrons piégés en fonction de la profondeur de l'échantillon et du temps d'irradiation.

Il est important de noter que ces explications ne sont pas réalisables avec un modèle 0D. En l'occurrence, le modèle RC ne considère pas les courants de conduction. Selon THEMIS, ils jouent un rôle important pour expliquer les phénomènes de conductivité induite sous irradiation.

- Résumé de la première phase

Le potentiel est gouverné principalement par l'implantation des électrons. Les électrons se piègent rapidement et restent proche de la surface. Les trous libres, générés en volume par le faisceau 400 keV, se déplacent progressivement en surface à mesure que leur densité et le champ électrique augmentent. En surface, ils écrantent le potentiel électrostatique induit par les électrons implantés par le faisceau 20 keV et se recombinent avec eux. Ces processus empêchent le potentiel de surface d'augmenter, ce qui mène à la jonction entre les phases 1 et 2, où le potentiel de surface ne croît plus. On atteint alors la deuxième phase.

3.2.2.2.2 2^{ème} phase du potentiel de surface

- Charge totale ρ

Lors de la deuxième phase, V_s diminue de 1500 secondes jusqu'à 6000 secondes. Comme pour la première phase, $\partial\rho/\partial t$ et son intégrale sont calculées en fonction de la profondeur. $\partial\rho/\partial t$ est tracé sur la Figure 3.50, 3000 secondes après le début de l'irradiation. On constate que $\partial\rho/\partial t$ est globalement positive, ce qui explique que V_s diminue. Pour confirmer cela, l'intégrale de $\partial\rho/\partial t$ ($\int_{0\mu m}^{127\mu m} \frac{\partial\rho}{\partial t} dx$) est tracée sur la Figure 3.51 pour différents temps d'irradiation. On constate qu'elle est toujours positive, en phase 2, confirmant que V_s diminue. Les valeurs prises par cette intégrale augmentent dans un premier temps jusqu'à 2000-2500 secondes après le début de l'irradiation, puis diminuent jusqu'en fin de deuxième phase. Cette cinétique est représentative de la variation temporelle de V_s . Quand $\int_{0\mu m}^{127\mu m} \frac{\partial\rho}{\partial t} dx$ augmente, la variation temporelle de V_s augmente. Cette cinétique est observable en début de deuxième phase, de 1500 secondes jusqu'à 2000-2500 secondes. Ensuite, $\int_{0\mu m}^{127\mu m} \frac{\partial\rho}{\partial t} dx$ diminue, ce qui signifie que la variation temporelle de V_s diminue. De 2000-2500 secondes jusqu'à 6000 secondes, V_s cesse d'augmenter aussi rapidement. L'origine de ces variations est expliquée ci-après sur la base du comportement des électrons et des trous :

- Electrons et trous

Lors de la 1^{ère} phase, les courants de conduction des trous ont suffisamment augmenté pour empêcher le potentiel de surface d'augmenter. Lors de la 2^{ème} phase, l'apport de trous est significatif pour que le potentiel de surface diminue (Figure 3.49). Par rétroactivité, l'intensité du champ électrique diminue elle aussi, ce qui réduit l'intensité des courants de conduction des

trous. Toutefois, cette réduction n'empêche pas le potentiel de surface de diminuer. Cela s'explique par une augmentation croissante de la densité de trous libres, sous l'influence du faisceau 400 keV, que l'on attribue à un long temps caractéristique de piégeage, qui maintient les courants de conduction des trous relativement hauts. Ces courants surpassent très légèrement le bilan d'accumulation d'électrons en surface par implantation, et de déficit d'électrons en surface par conduction. Le bilan global est positif, confirmé par la Figure 3.51. Pour illustrer l'augmentation de la densité de trous libres, cette dernière est représentée sur la Figure 3.59 en fonction de la profondeur de l'échantillon et du temps d'irradiation. Elle cesse d'augmenter 6000 secondes après le début de l'irradiation. Il s'agit de l'ordre de grandeur que nous avons attribué au temps caractéristique de piégeage des trous. Pour l'obtenir, nous avons supposé que l'arrêt de la diminution du potentiel de surface en fin de phase 2 était fortement corrélé à leur temps de piégeage.

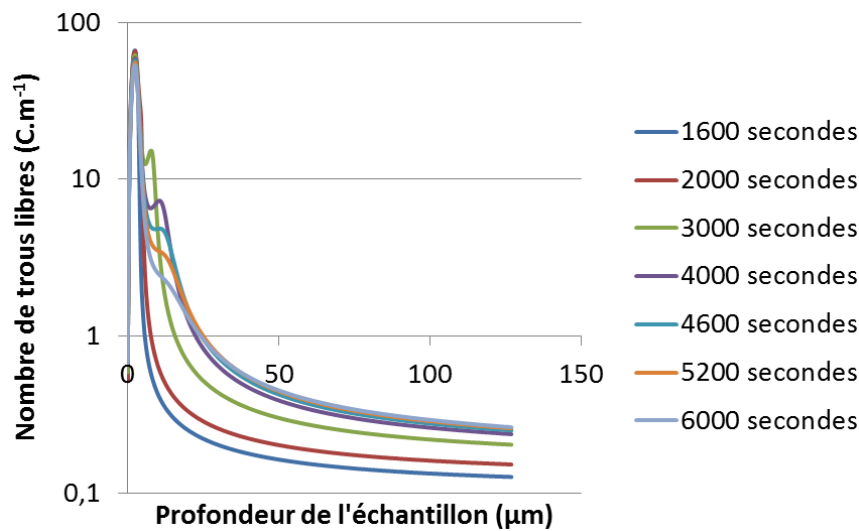


Figure 3.59 : Nombre de trous libres en fonction de la profondeur de l'échantillon pour différents temps d'irradiation.

- Résumé de la deuxième phase

Lors de la deuxième phase, l'accumulation des électrons par le faisceau 20 keV reste constante, mais le nombre de trous libres augmente, par ionisation, lié au faisceau 400 keV et à leur long temps caractéristique de piégeage. Le dipôle créé par l'implantation d'électrons en surface met les trous en mouvement qui se déplacent en surface et font diminuer V_s .

3.2.2.2.3 3^{ème} phase du potentiel de surface

- Charge totale ρ

Lors de la troisième phase, V_s augmente de nouveau à partir de 6000 secondes. Comme pour les phases précédentes, $\partial\rho/\partial t$ et son intégrale sont calculées en fonction de la profondeur. $\partial\rho/\partial t$

est tracé sur la Figure 3.50, 7500 secondes après le début de l'irradiation. On constate que $\partial\rho/\partial t$ est globalement négative en phase 3, ce qui explique que V_s augmente. Pour confirmer cela, l'intégrale de $\partial\rho/\partial t$ ($\int_{0\mu m}^{127\mu m} \frac{\partial\rho}{\partial t} dx$) est tracée sur la Figure 3.51 pour différents temps d'irradiation. On constate qu'elle est toujours négative, en phase 3, confirmant que V_s augmente.

- Electrons et trous

Nous avons vu lors de la deuxième phase que, par effet dipolaire et par augmentation croissante du nombre de trous libres, V_s diminuait. Lors de la troisième phase, V_s augmente à nouveau. Cela se traduit par une diminution des courants de conduction des trous, illustrée sur la Figure 3.60.

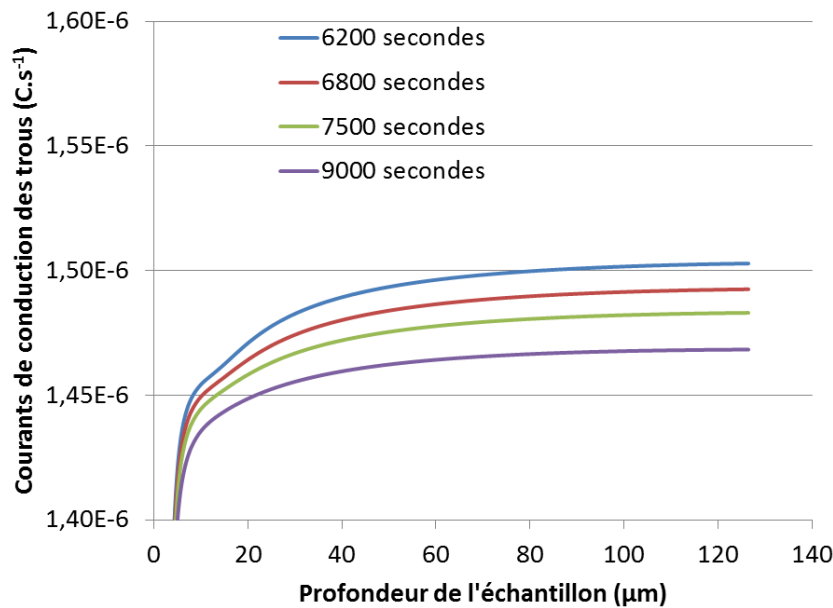


Figure 3.60 : Courants de conduction des trous en fonction de la profondeur de l'échantillon et du temps d'irradiation.

Les causes de cette diminution sont triples :

- Le piégeage progressif des trous libres : Les trous libres ont un temps caractéristique de piégeage de plusieurs milliers de secondes. Les trous libres générés lors de la première phase se piègent progressivement et leur nombre décroît (Figure 3.61).
- Les processus de recombinaison entre trous libres et électrons piégés : Au cours de l'irradiation, par ionisation, le faisceau 400 keV génère de plus en plus d'électrons. Ils sont rapidement piégés et agissent comme des centres de recombinaison envers les trous. L'influence de la recombinaison est notable pendant les phases 2 et 3.

Pour l'illustrer, trois valeurs différentes du coefficient de recombinaison α_3 ont été choisies : α_3 , $2\alpha_3$ et $\alpha_3/2$. α_3 correspond à la valeur qui fait correspondre les niveaux de potentiel obtenus par THEMIS avec les potentiels expérimentaux (Figure 3.49). Pour chaque valeur, le potentiel de surface est tracé sur la Figure 3.62. Plus la valeur de α_3 est grande, plus la probabilité de recombinaison entre trous libres et électrons piégés est importante. Pour de grandes valeurs de α_3 , les courants de conduction des trous diminuent, ce qui fait croître les niveaux de potentiel. La valeur de α_3 a été ajustée manuellement pour faire correspondre, en phases 2 et 3, les niveaux de potentiel numériques et expérimentaux. Cette valeur est représentative de la cinétique des phénomènes de recombinaison. Pour la déterminer, il a d'abord fallu restreindre les paramètres matériau, car la recombinaison est un phénomène qui intervient lorsque tous les autres phénomènes sont déjà actifs (piégeage, dé-piégeage, génération, implantation d'électrons et courants de charges).

- Le piégeage permanent des trous : Le dé-piégeage des trous a été déterminé, comme pour les coefficients de recombinaison, en dernier. Il a été ajusté manuellement pour faire correspondre les données numériques aux données expérimentales. Il semble que les trous soient, dans le Téflon® FEP, des charges stables et sont piégés de manière permanente.

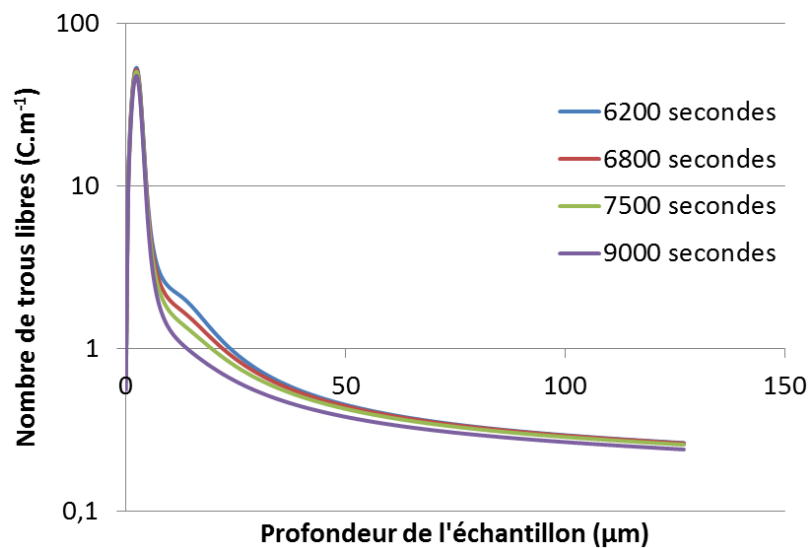


Figure 3.61 : Nombre de trous libres en fonction de la profondeur de l'échantillon et du temps d'irradiation.

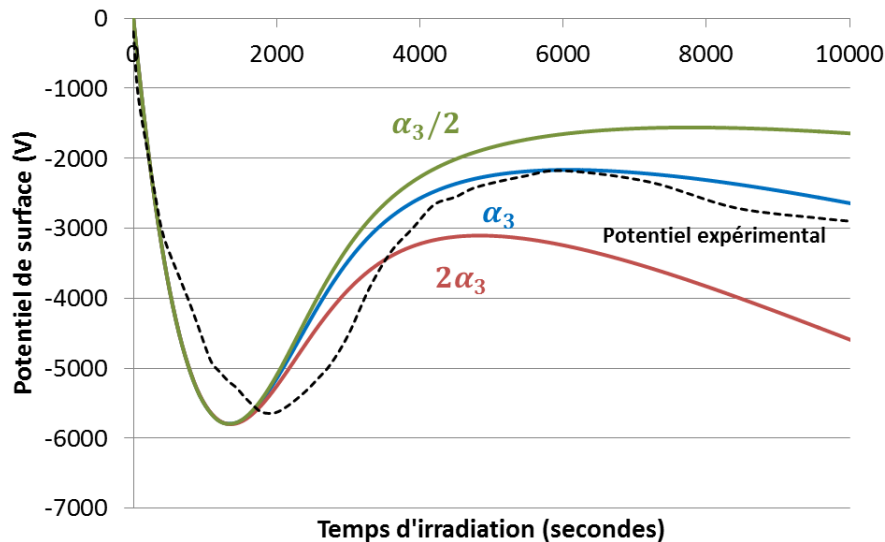


Figure 3.62 : Potentiel de surface en fonction du temps d'irradiation pour 3 coefficients de recombinaison. Le potentiel de surface expérimental est aussi représenté par la ligne noire, en pointillés.

- Résumé de la troisième phase

A la fin de la 2^{ème} phase, les trous libres se piègent de plus en plus et la probabilité de recombinaison avec les électrons piégés augmente, ce qui fait croître les niveaux de potentiel.

3.2.2.3 Incertitudes sur l'extraction des paramètres matériau

Dans les parties précédentes j'ai détaillé la méthodologie d'extraction des propriétés électriques du Téflon® FEP. Cette extraction a été réalisée sur la base de comparaisons croisées, entre les mesures expérimentales de potentiel et de densités de charges, et le modèle THEMIS. Les propriétés du Téflon® FEP ont été déterminées avec des ordres de grandeur et des incertitudes. Certains paramètres, tels que le temps de piégeage ou de dé-piégeage des électrons, sont plus aisés à déterminer. Pour cette raison, ils sont déduits en premier, ce qui permet de réduire les degrés de liberté du modèle THEMIS et de faciliter l'extraction d'autres paramètres. Le temps de piégeage/dé-piégeage des électrons a d'abord été déterminé, suivi du temps de piégeage des trous, de leur mobilité, des coefficients de recombinaison et du temps de dé-piégeage des trous. La méthode d'obtention et les incertitudes sur chacun des paramètres sont résumées ci-dessous.

Temps de piégeage et de dé-piégeage des électrons : L'incertitude sur le temps de piégeage et le temps de dé-piégeage des électrons est la plus faible. Les expériences réalisées à l'ONERA confirment un temps de piégeage de l'ordre de la seconde et un temps de dé-piégeage quasiment infini. Pour trouver ces valeurs, un échantillon de Téflon® FEP a été irradié par un faisceau de basse énergie. Le potentiel de surface a été mesuré pendant l'irradiation et la relaxation. Les résultats ont montré que le potentiel augmentait linéairement pendant la phase d'irradiation et ne diminuait pas pendant la phase de relaxation. Cela signifie que dans ce polymère, les électrons

sont des charges très stables. Le temps de piégeage des électrons est facile à déterminer, car aucun phénomène, excepté leur piégeage, n'est prépondérant en début d'irradiation. Cette expérience a permis d'établir un ordre de grandeur de la valeur du temps de piégeage et de dé-piégeage des électrons. Ces valeurs ont ensuite été confirmées et ajustées en utilisant le modèle THEMIS.

Temps de piégeage des trous : L'incertitude sur le temps de piégeage des trous est plus grande que sur celle des électrons. Il n'est pas possible d'observer directement leur piégeage, contrairement aux électrons. Pour connaître son ordre de grandeur, l'expérience en irradiation continue a été utilisée. Le temps caractéristique entre la 2^{ème} et la 3^{ème} phase nous a renseignés sur son ordre de grandeur, qui a ensuite été ajusté avec le modèle THEMIS.

Mobilité des électrons et des trous : Un ordre de grandeur de la mobilité des électrons a été approché en étudiant la 1^{ère} phase du potentiel de surface. L'évolution temporelle de ce dernier est gouvernée, pendant les premiers instants d'irradiation, par le produit Schubweg. Ce produit dépend du temps de piégeage et de la mobilité des charges. Par connaissance du temps de piégeage, il devient possible de déterminer la mobilité. Pour les trous, le même raisonnement a été appliqué. Par connaissance de leur temps de piégeage, leur mobilité a été ajustée manuellement, pour que les résultats de THEMIS correspondent aux résultats expérimentaux.

Coefficients de recombinaison et temps de dé-piégeage des trous : Les coefficients de recombinaison sont les paramètres les plus difficiles à déterminer. Leur incertitude est grande. En début d'irradiation ils ont peu d'influence sur les évolutions des niveaux de potentiel car les densités de charges sont faibles. Pour une irradiation prolongée, ils deviennent du même ordre de grandeur que les processus de piégeage, dé-piégeage, génération et conduction des charges, ce qui rend leur détermination moins évidente. Pour les déterminer, j'ai principalement étudié la 3^{ème} phase de l'irradiation continue, où la densité des charges est importante. La valeur des coefficients de recombinaison a de l'influence sur l'évolution temporelle des niveaux de potentiel lors de la 3^{ème} phase. Leur valeur a été ajustée pour obtenir la bonne pente de l'évolution temporelle du potentiel de surface lors de la 3^{ème} phase. Le dé-piégeage des trous est, comme les coefficients de recombinaison, l'un des derniers paramètres extrait. Il est ajusté manuellement pour que les résultats de THEMIS concordent avec les résultats expérimentaux.

Le nombre de paramètres est très grand et il est difficile d'être parfaitement représentatif des propriétés électriques du Téflon® FEP. En effet, le jeu de paramètres utilisé pour reproduire les irradiations successives est légèrement différent du jeu utilisé pour représenter les niveaux de potentiel. L'ordre de grandeur est peu différent, mais il reste difficile de caractériser un matériau avec une grande précision. Dans le chapitre 5, une synthèse des expériences réalisées lors de ce

travail de doctorat est faite. Elle met en avant les étapes qui consistent à caractériser les propriétés électriques d'un matériau par comparaisons croisées expérience/numérique.

3.2.3 Comportement du Kapton® HN

3.2.3.1 Description des résultats : analyse des différences entre les données expérimentales et les résultats de THEMIS

Cette partie a pour objectif de décrire les évolutions temporelles du potentiel de surface du Kapton® HN. Les explications sont succinctes, car la méthodologie d'extraction des paramètres du Kapton® HN est similaire au Téflon® FEP. L'objectif principal est de montrer que, bien que le Kapton® HN et le Téflon® FEP soient deux matériaux polymériques, ils présentent des comportements en charge très différents, car leurs propriétés électriques sont distinctes.

La Figure 3.63 décrit l'évolution temporelle du potentiel de surface irradié avec le banc d'essai SIRENE. Le potentiel de surface est tracé numérique (courbe bleue) et expérimentalement (courbe rouge). Sur chacune des courbes, on distingue 2 phases : la *première phase*, où V_s croît rapidement jusqu'à 1000 secondes dans le cas numérique ($V_s = -2100V$) et 600 secondes dans le cas expérimental ($V_s = -1800V$) ; La *deuxième phase* où il diminue lentement jusqu'à 10000 secondes. L'accord entre les résultats expérimentaux et numériques est bon. La cinétique de charge lors de la première et deuxième phase est correctement représentée. Il existe un léger écart entre les résultats de THEMIS et expérimentaux entre la phase 1 et 2. Les explications de ces écarts sont identiques à celles suggérées pour le Téflon® FEP (repoussement des électrons incidents par effet électrostatique et émission électronique secondaire à l'interface vide/diélectrique).

Comme pour le Téflon® FEP, le bon accord signifie que le jeu de paramètres trouvé pour le Kapton® HN est représentatif de ses propriétés électriques. Pour chacune des phases, les évolutions temporelles du potentiel de surface sont expliquées sur la base des résultats de simulation du modèle THEMIS. La charge totale ρ est d'abord étudiée suivie du comportement des électrons et des trous.

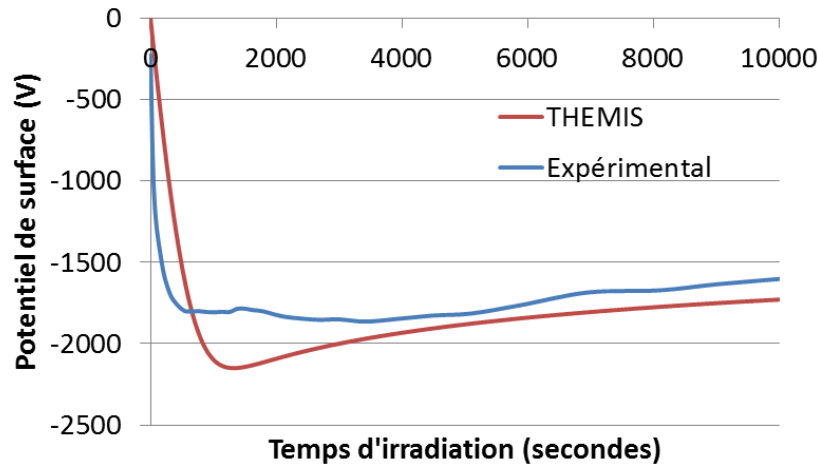


Figure 3.63 : Potentiel de surface du Kapton® HN en fonction du temps d'irradiation sous spectre SIRENE standard.

3.2.3.2 Analyse du comportement des charges dans le Kapton® HN sur la base des résultats numériques de THEMIS : comparaison avec le Téflon® FEP

3.2.3.2.1 1^{ère} phase du potentiel de surface

- Charge totale ρ

Lors de la 1^{ère} phase, V_s augmente jusqu'à environ 1000 secondes. $\partial\rho/\partial t$ et son intégrale sont calculées en fonction de la profondeur. $\partial\rho/\partial t$ est tracée sur la Figure 3.64, 100 secondes après le début de l'irradiation. On constate que $\partial\rho/\partial t$ est globalement négative, ce qui explique que V_s augmente. Pour confirmer cela, l'intégrale de $\partial\rho/\partial t$ ($\int_{0\mu m}^{127\mu m} \frac{\partial\rho}{\partial t} dx$) est tracée sur la Figure 3.65 pour différents temps d'irradiation. On constate qu'elle est toujours négative, en phase 1, confirmant que V_s augmente. Elle est de moins en moins négative en fonction du temps d'irradiation. Cela signifie que la cinétique de charge diminue, ce qui traduit un apport de plus en plus important de trous par conduction, en provenance du volume, sous l'effet de l'ionisation et du champ électrique. A partir de 1000 secondes, le potentiel cesse d'augmenter et commence à diminuer. Les mécanismes physiques responsables de ces évolutions sont détaillés ci-après.

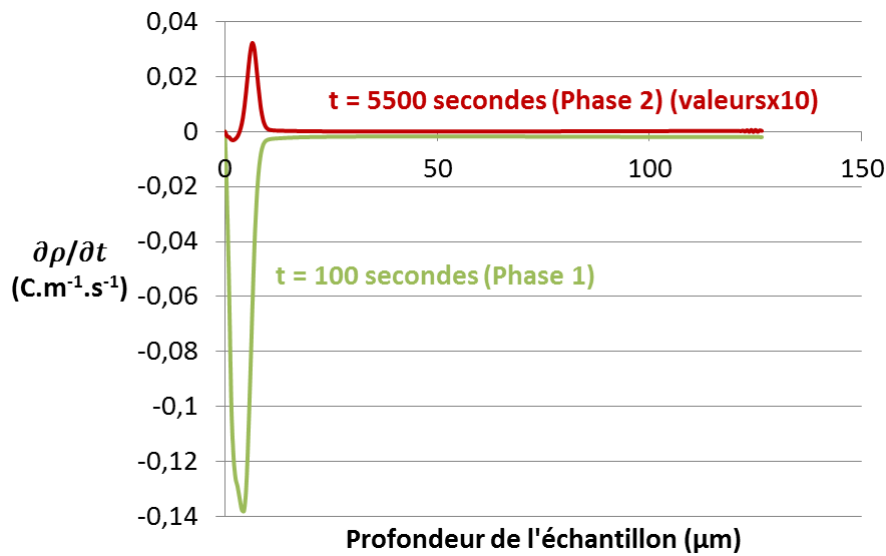


Figure 3.64 : Evolution temporelle de la densité totale de charges pour $t=100$ secondes (phase 1) et $t=5500$ secondes (phase 2), en fonction de la profondeur du matériau.

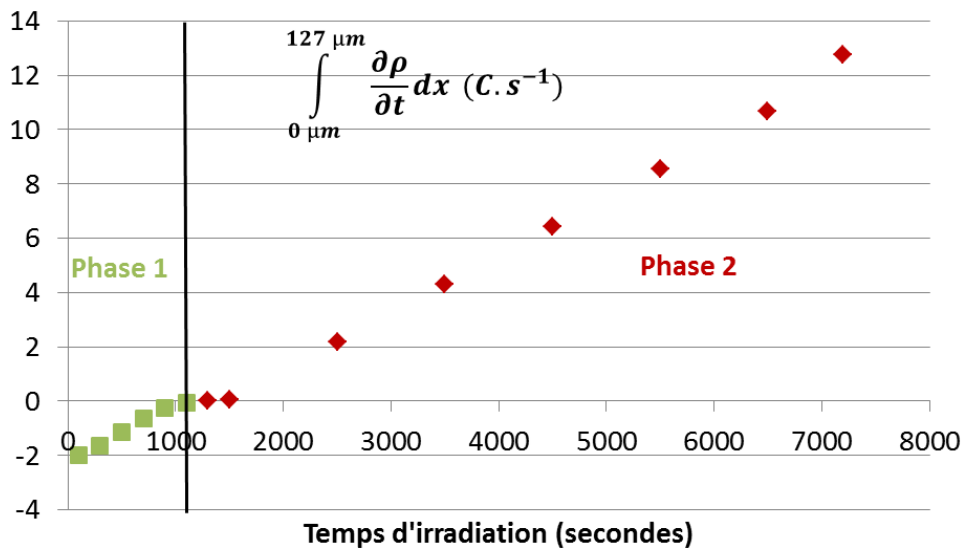


Figure 3.65 : Intégrale de la dérivée temporelle de la densité totale de charges pour plusieurs temps différents.

- Electrons et trous

Dans le Kapton® HN, les électrons se déplacent peu. Comme dans le Téflon® FEP, ce sont des charges stables et leur constante de Schubweg ($\mu \times \tau$) est faible. Les expériences qui ont permis de déterminer cela sont les mêmes que celles utilisées pour le Téflon® FEP. Sous l'influence du faisceau 20 keV, les électrons implantés restent proches de la surface. Ajouté à cela, il a été montré, en essayant de faire correspondre les données de THEMIS aux données expérimentales de mesure de potentiel, que les trous sont des charges très peu mobiles. Leur constante de Schubweg est plusieurs ordres de grandeur inférieure à celle du Téflon® FEP, ce qui explique que V_s augmente rapidement lors de la 1^{ère} phase.

3.2.3.2.2 2^{ème} phase du potentiel de surface

- Charge totale ρ

Lors de la 2^{ème} phase, V_s décroît lentement à partir de 1000 secondes. $\partial\rho/\partial t$ et son intégrale sont calculées en fonction de la profondeur. $\partial\rho/\partial t$ est tracée sur la Figure 3.64, 5500 secondes après le début de l'irradiation. $\partial\rho/\partial t$ est globalement positive, ce qui explique que V_s augmente. $\partial\rho/\partial t$ est négative sur les premiers microns à cause de l'implantation d'électrons qui est supérieure au flux de trous arrivants (flux dû à l'effet du champ électrique). Pour confirmer cela, l'intégrale de $\partial\rho/\partial t$ ($\int_{0\mu m}^{127\mu m} \frac{\partial\rho}{\partial t} dx$) est tracée sur la Figure 3.65 pour différents temps d'irradiation. Elle est toujours positive, confirmant que V_s augmente.

- Electrons et trous

Les électrons, qui sont des charges stables dans le Kapton® HN, ne sont pas responsables de la diminution de V_s , observée dans phase 2. Ce sont les trous qui génèrent ce comportement, en se déplaçant vers la surface, sous l'influence du champ électrique créé lors de la première phase par l'implantation d'électrons. L'évolution temporelle de V_s est expliquée par le comportement des trous, mais elle diffère de celle du Téflon® FEP. Cela signifie que les caractéristiques des trous dans le Kapton® HN ne sont pas les mêmes que dans le Téflon® FEP. Dans ce dernier, les trous sont des charges peu mobiles, qui se piègent lentement et restent piégées de manière permanente. Dans le Kapton® HN, THEMIS a attribué aux trous un comportement bien différent : ils sont moins mobiles, se piègent plus rapidement, mais se dé-piègent presque instantanément à l'échelle de vie du satellite. Le dé-piégeage croissant est caractéristique de la diminution de V_s et la faible constante de Schubweg ($\mu \times \tau$) est caractéristique d'un lent déplacement des trous, donc d'une cinétique de décroissance de la part de V_s relativement lente.

L'influence des coefficients de recombinaison dans le Kapton® HN a été beaucoup moins étudiée que dans le Téflon® FEP. A ce jour, il est difficile de leur attribuer un bon ordre de grandeur.

3.2.3.3 Incertitudes sur l'extraction des paramètres

Le Kapton® HN est un matériau bien différent du Téflon® FEP, mais les causes des incertitudes sur les paramètres extraits ne sont pas différentes de celles décrites dans la partie 3.2.2.3.

3.2.3.4 Etude du Kapton® HN : vers une amélioration du modèle THEMIS

La partie 3.2.3.2 a décrit le comportement en charge du Kapton® HN sous irradiation représentative de l'environnement spatial. Des expériences de mesure du courant menées à l'ONERA ont montré que le Kapton® HN a un comportement non linéaire avec le champ

électrique. Des échantillons métallisés sur leur face avant et arrière ont été irradiés. Un champ électrique macroscopique a été appliqué et modifié d'une expérience à l'autre. Pour une augmentation du champ électrique d'un facteur deux, le courant mesuré n'augmente pas du même facteur. Ce comportement traduit une dépendance non linéaire de l'interaction électron-matière et du transport de charges avec le champ électrique. La mise en évidence de ces effets a conduit à effectuer une recherche approfondie dans la littérature pour en déterminer les phénomènes physiques responsables. Deux modèles permettent de les expliquer : il s'agit du modèle d'Onsager et de Poole-Frenkel, décrits dans le chapitre 2, dans la partie 2.3.2.3. Ces effets sont étudiés dans le chapitre 4, sur le Kapton® HN. S'ils ne sont pas pris en compte dans le modèle, il est impossible, pour un même jeu de paramètres matériau, de représenter simultanément les niveaux de potentiel et de courants du Kapton® HN, pour deux expériences différentes.

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre, j'ai présenté la construction numérique du modèle THEMIS et les principales méthodes de résolution numérique utilisées. J'ai également montré les avantages de représenter les matériaux en 1D et de distinguer le comportement des électrons et des trous. THEMIS a été appliqué pour deux matériaux, le Téflon® FEP et le Kapton® HN, fréquemment utilisés en environnement spatial. Le comportement en charge de ces deux matériaux sous irradiation représentative de l'environnement spatial a été expliqué à l'aide de THEMIS. THEMIS a aussi permis de comparer les propriétés électriques de ces deux polymères.

- **Méthodes numériques**

Maillage : Pour limiter le temps de calcul du modèle THEMIS et améliorer la résolution des phénomènes physiques en surface, le maillage mixte a été choisi. Il est composé d'une partie raffinée proche de la surface, et uniforme, moins raffinée, dans le volume du matériau.

Densités de charges : Le schéma numérique utilisé pour les densités de charges est une méthode d'Euler explicite d'ordre 1. La résolution des équations est plus facile à mettre en œuvre, mais le schéma numérique est plus instable que les autres. Pour les courants de convection, le schéma Donneur-Accepteur a été utilisé pour discrétiser les équations de courant. Pour le potentiel électrostatique, l'algorithme de Thomas est utilisé.

- **Comparaison du transport de charges des polymères étudiés**

Téflon® FEP : Deux expériences ont été menées sur le Téflon® FEP. La première, en irradiation successive, et la deuxième, en irradiation continue, pour des conditions d'irradiation extrêmes de l'orbite géostationnaire. Les résultats donnés par THEMIS sont en bon accord avec

les résultats expérimentaux. Contrairement à de nombreux modèles qui ne considèrent que le comportement des électrons, nous avons montré que le comportement des trous est important à prendre en compte. Il apparaît, dans le Téflon® FEP, que les électrons sont des charges très mobiles, mais qui se piègent instantanément et de manière permanente. Les trous sont peu mobiles, se piègent lentement et de manière permanente. Les électrons gouvernent les évolutions de potentiel pour des temps courts, et les trous pour des temps moyens, de l'ordre de quelques milliers de secondes. Pour des temps très longs, à partir de quelques milliers de secondes, les phénomènes de recombinaison deviennent prépondérants. En revanche, il apparaît difficile de préciser la valeur des coefficients de recombinaison, de par la multitude de phénomènes physiques présents.

Kapton® HN : Une seule expérience a été menée sur le Kapton® HN. Le matériau a été irradié par le spectre SIRENE standard, représentatif des conditions environnementales en période d'orages magnétiques. Comme pour le Téflon® FEP, la cinétique du potentiel de surface du matériau est bien représentée par le modèle THEMIS. Le Kapton® HN possède les mêmes propriétés électriques que le Téflon® FEP pour les électrons. Cependant, la cinétique de piégeage, de dé-piégeage et de mobilité des trous n'est pas la même, ce qui explique les différences de comportement en charge et justifie l'importance de distinguer le comportement de ces deux espèces.

Ces résultats montrent que la physique du transport de charges dans les polymères est gouvernée par des phénomènes physiques qui possèdent des temps caractéristiques bien différents. Certains, tels que les temps de piégeage, agissent rapidement. D'autres, tels que les temps de dé-piégeage, agissent plus lentement. Enfin, les phénomènes de recombinaison agissent le plus tardivement.

Pour les deux matériaux, l'avantage de THEMIS est double. 1) Contrairement à un modèle 0D, il permet d'être représentatif de spectres distribués en énergie. L'implantation des électrons et la génération de paires électron-trou sont décrites avec précision dans la profondeur du matériau. 2) THEMIS prend en compte les inhomogénéités de densités de charges et de champ électrique au niveau microscopique, ce qui permet de calculer les courants de conduction des électrons et des trous. Les points 1) et 2) permettent, à l'aide de THEMIS, de comprendre au niveau microscopique et en fonction du temps d'irradiation et de la profondeur du matériau, le comportement des charges.

- **Effet du champ électrique**

Des expériences menées à l'ONERA [80] ont montré que le Kapton® HN est sensible à l'effet du champ électrique. Si son influence n'est pas prise en compte dans THEMIS, il n'est pas

possible d'être simultanément représentatif, avec un le même jeu de paramètres, des niveaux de potentiel et de courant du Kapton® HN, dans le cadre de deux expériences différentes. L'influence de cet effet sur l'interaction électron-matière et le transport des charges sera décrite dans le chapitre 4, uniquement pour le Kapton® HN. Plus précisément, son effet est décrit sur la génération de paires électron-trou, la mobilité des charges et leur temps de dé-piégeage.

CHAPITRE 4. Prise en compte de l'effet du champ électrique sur la conductivité des charges dans le modèle THEMIS

Dans le chapitre précédent, j'ai montré l'intérêt d'utiliser un modèle 1D plutôt que 0D. Cela a permis de mieux comprendre et prédire le comportement en charge du Téflon® FEP et du Kapton® HN sous irradiation représentative de l'environnement spatial. Cette étude a également permis d'étudier et de comparer les propriétés électriques de ces deux polymères. Dans ce chapitre, je présente une étude qui a pour objectif de comprendre l'influence du champ électrique sur l'interaction électron-matière et le transport de charges dans le Kapton® HN. Ce matériau a fait l'objet de recherches plus approfondies que le Téflon® FEP [80], car l'effet du champ électrique semble moins important sur ce dernier. De plus, les données expérimentales disponibles sur le Kapton® HN sont plus importantes, ce qui en fait un meilleur matériau pour étudier les effets du champ électrique. Pour cette étude, les expériences ont été réalisées à température ambiante. L'effet de la température n'a pas été étudié et fera partie des perspectives de ce travail, car cela nécessiterait de nouvelles expérimentations dédiées à ce phénomène.

Dans la première partie de ce chapitre, je décris les expériences réalisées à l'ONERA, qui ont permis de mettre en évidence l'effet du champ électrique sur l'interaction électron-matière et le comportement des charges dans ce matériau.

Dans la deuxième partie, je présente les phénomènes physiques qui expliquent cette dépendance : effet tunnel, effet Poole-Frenkel et effet d'Onsager. Ces effets agissent sur la mobilité effective des charges (effets tunnel et Poole-Frenkel), sur leur taux de dé-piégeage (effet Poole-Frenkel) et sur la génération des paires électron-trou (effet d'Onsager). Je montrerai comment ils ont été intégrés au code THEMIS, et validés en utilisant des mesures expérimentales de courant et de potentiel de surface, réalisées à l'ONERA.

4.1 Mise en évidence de l'effet du champ électrique dans le Kapton® HN

L'influence du champ électrique sur l'interaction électron-matière et le transport de charges dans certains polymères a été théorisée, et mise en évidence expérimentalement par de nombreux auteurs [2]–[10]. De récentes études, menées à l'ONERA sur le Kapton® HN, ont confirmé l'influence du champ électrique sur ce matériau. Elles ont permis de mieux la quantifier, afin de mieux prédire son comportement en charge sous irradiation représentative de l'environnement spatial. Les expériences spécifiquement mises en place pour étudier l'effet du champ électrique sont présentées dans la partie 4.1.1. Dans la partie 4.1.2, je présente les étapes de la réflexion qui a permis de déterminer les paramètres susceptibles de dépendre du champ

électrique. Ces paramètres sont en particulier la génération de paires électron-trou, la mobilité des charges et leur temps caractéristique de dé-piégeage.

4.1.1 Protocole expérimental : Kapton® HN

Pour étudier l'influence du champ électrique sur l'interaction électron-matière et le transport de charges, 4 expériences ont été réalisées. Les trois premières expériences sont réalisées sous un faisceau mono-énergétique, de haute énergie, lorsque le matériau est métallisé sur sa face avant et sa face arrière. La dernière expérience est réalisée sous un spectre en énergies.

- 1^{ère} expérience : Mesure de courant – Irradiation faible flux et longs temps

Dans la 1^{ère} expérience, l'échantillon est irradié pendant 30 minutes avec un faisceau d'électrons mono-énergétique de 400 keV, de flux 4 pA/cm². L'irradiation est suivie de 2 heures de relaxation, période pendant laquelle l'échantillon n'est plus irradié. La Figure 4.66 représente schématiquement l'irradiation de cet échantillon de Kapton® HN de 25 µm, par un faisceau 400 keV. Le vide est réalisé dans la chambre à hauteur de 10⁻⁶ hPa, et le matériau est métallisé sur sa face avant et sa face arrière. Sur l'électrode 1 est appliqué un potentiel négatif. L'électrode 2 est mise à la masse. Cela permet d'appliquer une différence de potentiel négative, donc un champ électrique négatif sur le matériau. Ce champ électrique est indépendant du temps et uniforme en volume, ce qui permet de dissocier les effets de dose et du champ électrique sur la RIC. Dans cette expérience, le courant est mesuré à l'aide d'un pico-ampèremètre, sur la face arrière de l'échantillon. Le potentiel de surface n'est pas mesuré, car il est constant au niveau de la métallisation. Les résultats sont présentés sur la Figure 4.68 et décrits dans la partie 4.1.2.1.

- 2^{ème} expérience : Mesure de courant – Irradiation faible flux et courts temps

Dans la 2^{ème} expérience, l'échantillon est irradié pendant 30 secondes avec un faisceau d'électrons mono-énergétique de 400 keV, de flux 6 pA/cm². L'irradiation est suivie de 30 minutes de relaxation, période pendant laquelle l'échantillon n'est plus irradié. La géométrie est la même que celle présentée dans la 1^{ère} expérience (Figure 4.66). Cependant, l'échantillon de Kapton® HN mesure 50 µm d'épaisseur. Les mesures de courant sont présentées sur la Figure 4.69 et la Figure 4.70 et décrites dans la partie 4.1.2.2.

- 3^{ème} expérience : Mesure de courant – Irradiation fort flux et très courts temps

Dans la 3^{ème} expérience, l'échantillon est irradié pendant 10 secondes avec un faisceau d'électrons mono-énergétique de 400 keV, de flux 37 pA/cm². L'irradiation est suivie de quelques secondes de relaxation, période pendant laquelle l'échantillon n'est plus irradié. La géométrie est la même que celle présentée dans la 1^{ère} expérience (Figure 4.66). L'échantillon

de Kapton® HN mesure 50 μm d'épaisseur. Les mesures de courant sont présentées sur la Figure 4.71 et décrites dans la partie 4.1.2.3.

- 4^{ème} expérience : Mesure de potentiel de surface – Irradiation fort flux et longs temps

Dans la 4^{ème} expérience, l'échantillon est irradié pendant 2 heures avec le spectre SIRENE standard présenté dans le chapitre 3 (section 3.2.1.1). L'échantillon est ensuite relaxé pendant 3 heures. La Figure 4.67 est une représentation schématique de l'irradiation de l'échantillon de Kapton® HN, sous spectre SIRENE standard. Le vide est établi dans la chambre à 10^{-6} hPa. Le matériau est mis à la masse sur sa face arrière à l'aide d'une électrode conductrice. Dans cette expérience, le potentiel de surface est mesuré à l'aide d'une sonde Kelvin. Les résultats sont présentés sur la Figure 4.81 et décrits dans la partie 4.2.2.2.

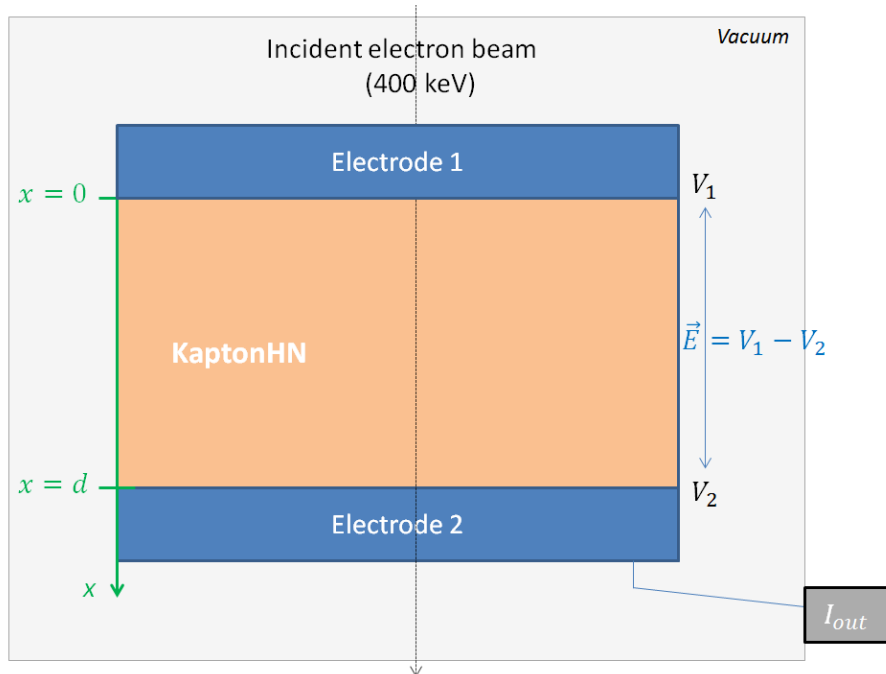


Figure 4.66 : Représentation en une dimension (1D) d'un échantillon de Kapton® HN métallisé sur sa face avant et sa face arrière. $x=0$ et $x=d$ correspondent aux jonctions entre le polymère et les électrodes. L'échantillon est irradié avec un faisceau de 400 keV qui passe au travers, sans implanter d'électrons. Une différence de potentiel est appliquée en utilisant les électrodes. Cela permet d'appliquer un champ électrique constant pendant l'irradiation.

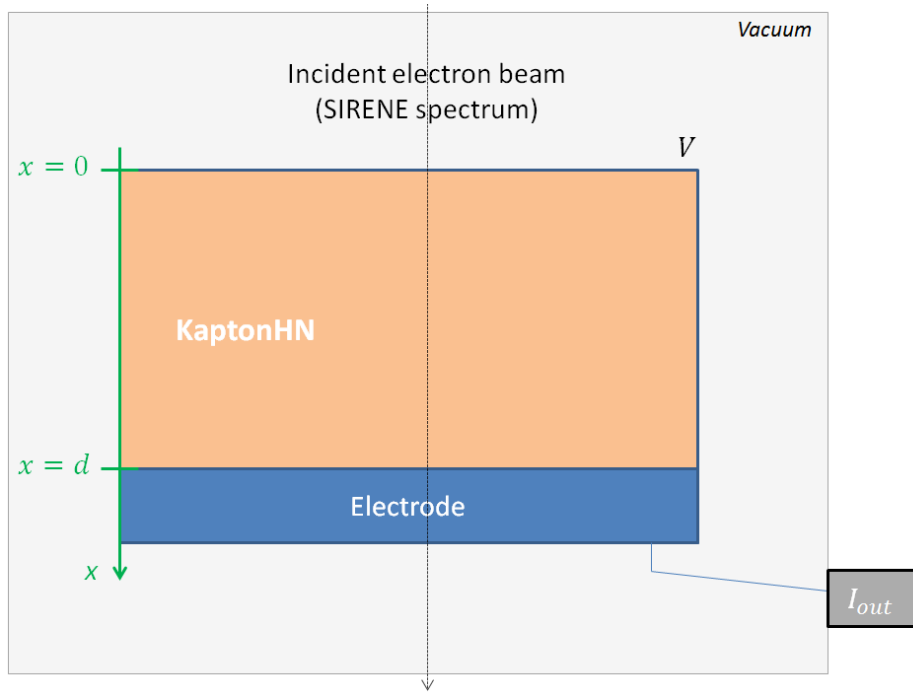


Figure 4.67 : Représentation en une dimension (1D) d'un échantillon de Kapton® HN métallisé sur sa face arrière. L'échantillon est en contact direct avec le vide. $x=0$ est la jonction avec le vide et $x=d$ est la jonction avec l'électrode. V est le potentiel de surface mesuré par sonde Kelvin.

Les trois premières expériences permettent d'étudier l'influence d'un champ électrique, dans un large intervalle [$2 \times 10^6 \text{ V/m} < E < 8 \times 10^7 \text{ V/m}$], sur les phénomènes d'interaction électron-matière et sur le comportement des charges dans le matériau. Pour les deux premières expériences, il a été choisi de travailler avec de très faibles flux et de très hautes énergies, pour réduire considérablement la dose totale déposée, et l'implantation d'électrons dans le matériau. Dans la 3^{ème} expérience, le flux d'électrons incidents est plus fort que dans les deux premières expériences, ce qui facilitera, comme je le détaillerai dans la partie 4.2.1.2, l'extraction du paramètre décrivant le rendement de production de paires d'ions thermalisés par électron absorbé φ_0 . Ce paramètre a été présenté dans le chapitre 2, dans la partie (2.3.1.3.2), décrivant la probabilité de générer de manière effective une paire électron-trou libre dans le matériau. Ces trois configurations permettent de ne pas créer une charge d'espace dans la profondeur du matériau, qui conduirait à la génération d'un champ électrique interne inhomogène qui dépendant du temps d'irradiation. Lors de ces premières expériences, le seul champ électrique existant est le champ électrique géométrique appliqué par les électrodes. Pour prévenir les effets transitoires de la polarisation de l'échantillon sur la RIC, le champ électrique a été appliqué plusieurs heures avant le début de l'irradiation, pour permettre au courant de polarisation de s'annuler avant le démarrage de l'irradiation.

La 4^{ème} expérience permet de vérifier et de quantifier l'effet du champ électrique sur la RIC en situation réelle, sous un environnement radiatif représentatif de l'orbite géostationnaire, avec de forts débits de doses et une forte implantation d'électrons.

4.1.2 Phénoménologie : mise en évidence de l'effet du champ électrique sur la génération et le transport des charges

Dans cette section, l'effet du champ électrique sur la génération et le transport des charges est mis en évidence en utilisant les trois premières expériences. Les résultats de l'expérience 1 sont présentés sur la Figure 4.68. Les résultats de l'expérience 2 sont présentés sur la Figure 4.69 et la Figure 4.70. Les résultats de l'expérience 3 sont présentés sur la Figure 4.71. Ces figures représentent les calculs de conductivité, sur la base de mesures expérimentales de courants, en fonction du champ électrique appliqué et du temps d'irradiation.

4.1.2.1 Présentation de l'expérience 1 : Mesure de courant – Irradiation faible flux et longs temps

La Figure 4.68 représente les calculs de conductivité réalisés à partir des résultats de l'expérience 1, en fonction du temps d'irradiation, pour 4 potentiels différents appliqués sur l'électrode 1 : -400 V, -800 V, -1000 V et -2000 V. Ces 4 potentiels correspondent à 4 valeurs de champ électrique différentes : $-1,6 \times 10^7 \text{ V/m}$, $-3,2 \times 10^7 \text{ V/m}$, $-4 \times 10^7 \text{ V/m}$ et $-8 \times 10^7 \text{ V/m}$. La valeur critique du champ électrique menant à un risque de rupture électrique du polymère est environ de $-3 \times 10^8 \text{ V/m}$. Cette valeur n'est pas dépassée par le plus fort champ électrique imposé. Il n'y a pas de risque qu'une décharge électrique se produise. La conductivité σ ($\Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$) est calculée par mesure du courant :

$$\sigma = \frac{J_{exp}}{E} \quad (4.1.2.1)$$

J_{exp} est le courant mesuré en A/m^2 et E le champ électrique appliqué en V/m . Les résultats de la Figure 4.68 montrent que la conductivité augmente avec le champ électrique. Pour chaque champ électrique, on distingue 4 phases. Sur la base des propriétés électriques du Kapton® HN et du comportement des charges sous irradiation (description faite dans le chapitre 3), j'explique succinctement les évolutions de la conductivité lors des 4 phases :

a) Lors de la *phase transitoire*, la conductivité augmente rapidement, pendant les premières secondes après le début de l'irradiation. Cette augmentation dépend directement du terme de génération de paires électron-trou. En fin de *phase transitoire*, la valeur de la conductivité semble dépendre de la valeur du champ électrique, excepté pour les potentiels -800

V et -1000 V, qui présentent une valeur semblable de conductivité autour de $1,2 \times 10^{-15} \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$. Ce peut être justifié par les valeurs de champ électrique qui sont très proches l'une de l'autre.

b) Lors de la *phase d'augmentation lente*, les charges commencent à se piéger et la conductivité cesse d'augmenter aussi rapidement (de quelques secondes après le début de l'irradiation à 30 minutes). Le nombre d'électrons libres, générés par ionisation, reste relativement constant au cours du temps car ces derniers se piègent très vite. Leur nombre atteint rapidement un état stationnaire. Les trous, qui se piègent plus tardivement, persistent après ionisation et leur nombre augmente graduellement (quasiment linéairement). Les trous libres générés en volume s'accumulent dans le matériau sur les premières secondes d'irradiation (chapitre 3, partie 3.2.3, explications relatives au Kapton® HN). De plus, leur temps caractéristique de dé-piégeage est faible et du même ordre de grandeur que la durée de l'expérience. Par conséquent, pendant la phase d'irradiation, le dé-piégeage des trous augmente graduellement à mesure que le nombre de trous piégés augmente. Comme je l'explique dans la partie 4.2.2, ce dé-piégeage est aidé par l'effet du champ électrique. En combinant les phénomènes de création de charges libres liée au taux de génération des paires électron-trou et de dé-piégeage assistés par effet du champ électrique, ceux-ci sont légèrement supérieurs au taux de piégeage des porteurs de charge. Il en résulte que la conductivité augmente graduellement.

c) Lors de la *phase de chute brutale*, lorsque l'irradiation est arrêtée, la conductivité diminue très rapidement pendant quelques secondes. Cette chute est liée au piégeage rapide des charges. Quand l'irradiation est arrêtée, les charges ne sont plus créées par génération. Les électrons libres restants sont piégés très rapidement et les trous plus lentement. Il ne reste alors plus qu'une conductivité des trous, celle des électrons s'éteignant très rapidement.

d) Lors de la *phase de diminution lente*, qui s'étend de quelques secondes après l'arrêt de l'irradiation jusqu'à la fin de la mesure, les niveaux de conductivités diminuent lentement. Cette cinétique est liée, comme expliquée dans le point b), à un nombre de charges piégées important et à un grand taux de dé-piégeage, assisté par effet de champ électrique. Les charges qui se dé-piègent se recombinent avec les charges de signe opposé, ce qui, couplé à une absence de génération de porteurs, diminue la conductivité.

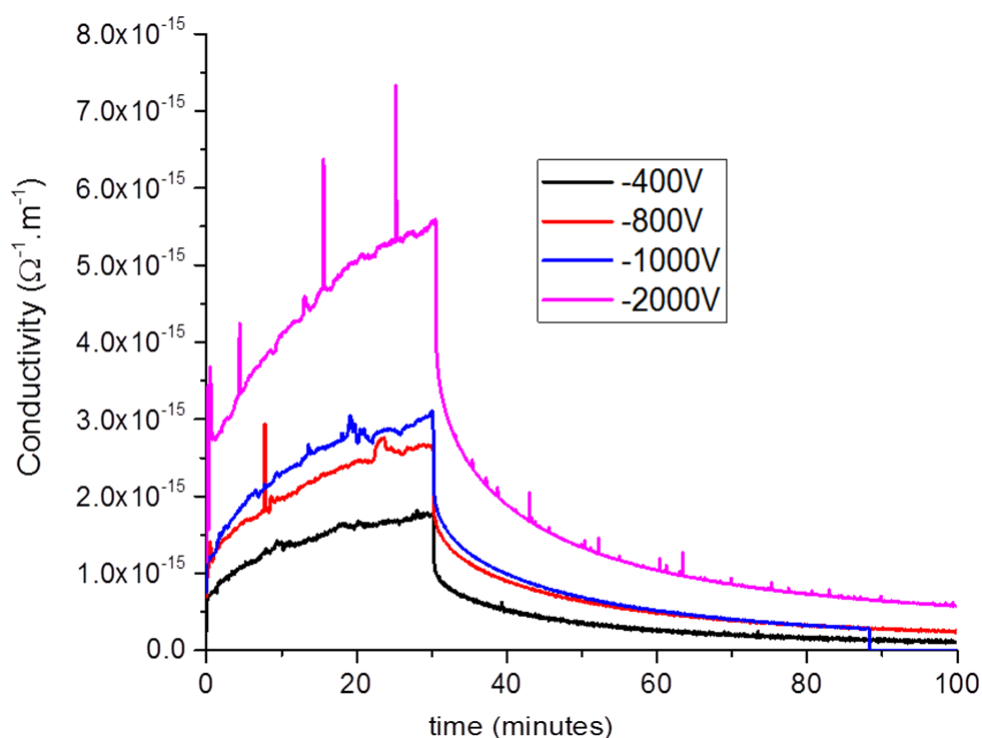


Figure 4.68 : Calcul des niveaux de conductivité pour 4 champs électriques différents appliqués sur le matériau. La configuration expérimentale est celle présentée sur la Figure 4.66. Le matériau irradié est un échantillon de Kapton® HN de 25 μm . Le polymère est d'abord irradié pendant 30 minutes, puis l'irradiation est arrêtée et le matériau est relaxé pendant plus d'une heure.

Cette première expérience a permis de mettre en évidence, d'après la Figure 4.68, une influence claire du champ électrique sur les niveaux de conductivité. Il semble, basé sur les premières secondes d'irradiation, que le champ électrique a une influence sur la génération de paires électron-trou. Lors de la phase d'augmentation lente, les cinétiques de conductivité diffèrent avec la valeur du champ électrique, ce qui traduit un effet de ce dernier sur la mobilité des charges ou leur dé-piégeage.

4.1.2.2 Présentation de l'expérience 2 : Mesure de courant – Irradiation faible flux et courts temps

La Figure 4.69 représente les calculs de conductivité, en fonction du temps d'irradiation, pour 6 potentiels différents appliqués sur l'électrode 1 : -100 V, -200 V, -400 V, -600 V, -800 V et -1000 V. Ces 6 potentiels correspondent à 6 valeurs de champ électrique différentes : $-2 \times 10^6 \text{ V/m}$, $-4 \times 10^6 \text{ V/m}$, $-8 \times 10^6 \text{ V/m}$, $-1,2 \times 10^7 \text{ V/m}$, $-1,6 \times 10^7 \text{ V/m}$ et $-2 \times 10^7 \text{ V/m}$. Comme pour l'expérience 1, il n'y a pas de risque qu'une décharge électrique se produise, car les valeurs de champ électrique sont inférieures à la valeur critique de champ. La conductivité est calculée en utilisant l'équation (4.1.2.1). Les cinétiques de croissance et décroissance de la conductivité semblent différentes de celles présentées sur la

Figure 4.68 (expérience 1). Les temps d'irradiation présentés sur la Figure 4.69 (expérience 2) sont plus courts, ce qui ne permet pas d'observer les effets cumulatifs de la dose sur la conductivité du matériau.

a) Comme pour l'expérience 1, lors de la *phase transitoire*, la conductivité est proportionnelle au nombre d'électrons libres et de trous libres générés dans le volume du matériau. Ce nombre, comme nous le verrons dans la suite, dépend du champ électrique, par l'effet d'Onsager.

b) Lors de la *phase d'augmentation lente*, la conductivité diminue lentement à partir de 5 secondes après le début de l'irradiation jusqu'à la fin de l'irradiation (30 secondes après le début de l'irradiation). Le comportement de la conductivité lors de cette phase est le même que celui décrit pour l'expérience 1.

c) Lors de la *phase de chute brutale*, quand l'irradiation est arrêtée, le taux de génération des paires électron-trou s'arrête. Les charges libres restantes se piègent rapidement, et la conductivité chute sur les premières secondes qui suivent le début de la phase de relaxation.

d) Lors de la *phase de diminution lente*, la conductivité décroît lentement. Sous l'effet du champ électrique, les charges se dé-piègent. Ces charges, dé-piégées, se recombinent avec les charges de signe opposé. Leur annihilation réduit lentement les niveaux de conductivité.

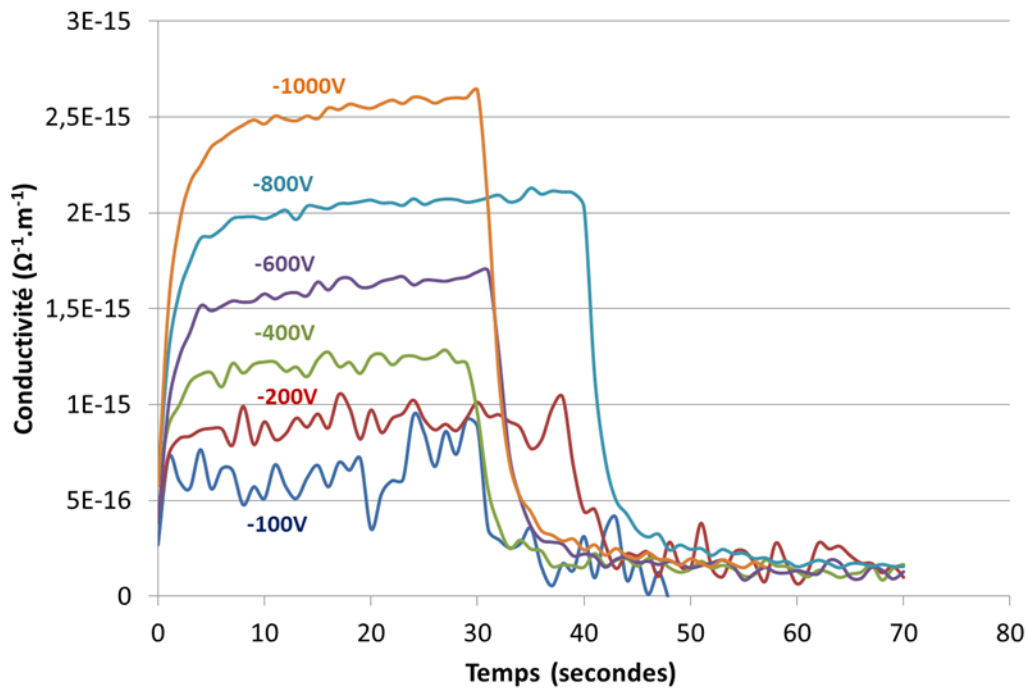


Figure 4.69 : Calcul des niveaux de conductivité pour 6 champs électriques différents appliqués sur l'échantillon. La configuration expérimentale se réfère à celle présentée sur la Figure 4.66. Le matériau est un échantillon de Kapton® HN de 50 μm . L'échantillon est d'abord irradié pendant 30 secondes. Ensuite, l'irradiation est arrêtée et le polymère est relaxé pendant quelques minutes, mais seulement les 40 premières secondes sont affichées.

Les données expérimentales présentées sur la Figure 4.69 présentent de fortes fluctuations, car le courant mesuré est faible. Cela s'explique par des champs électriques faibles, qui génèrent de bas courants. De plus, le flux d'électrons incidents est faible, ce qui diminue le taux de génération de paires électron-trou, et donc le courant de charges. Les courants mesurés peuvent alors être du même ordre de grandeur que l'erreur faite sur la mesure par les instruments. Pour réduire le bruit du signal mesuré et étudier plus aisément la dépendance de la conductivité avec le champ électrique, cette dernière a été moyennée pendant la *phase d'augmentation lente* (entre la 10^{ème} et 30^{ème} seconde), pour chaque valeur du champ électrique. Les résultats sont affichés sur la Figure 4.70, qui représente le logarithme naturel de la conductivité moyennée en fonction de la racine carrée du champ électrique. La dépendance entre le logarithme naturel de la conductivité et la racine carrée du champ électrique est linéaire. Cela signifie que la conductivité varie exponentiellement avec la racine carrée du champ électrique.

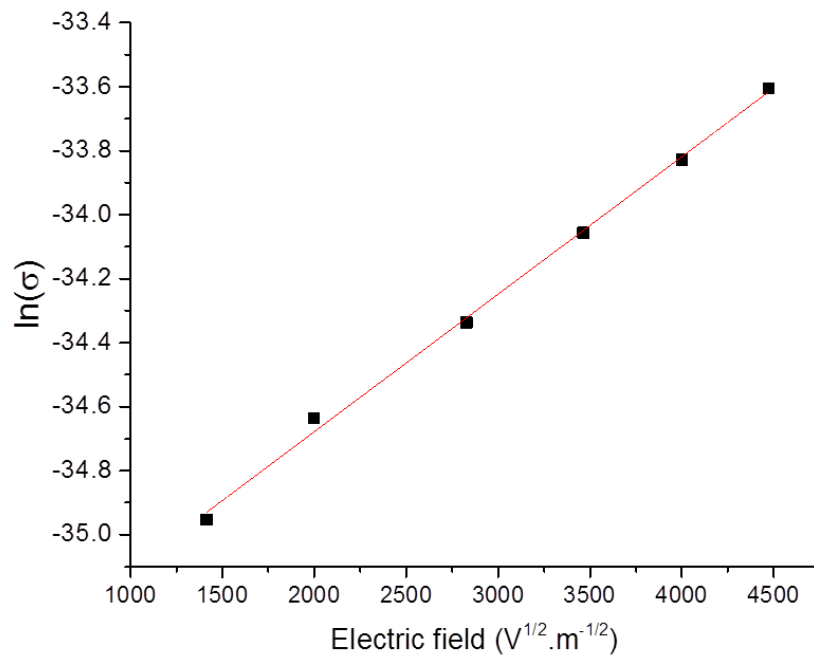


Figure 4.70 : Logarithme naturel de la conductivité en fonction de la racine carrée du champ électrique. Les conductivités représentées sont celle de la Figure 4.69. Elles ont été moyennées au niveau de leur plateau (entre 10 et 30 secondes), pour chaque valeur du champ électrique.

Les mesures de conductivité de l'expérience 2 montrent, comme pour l'expérience 1, une dépendance de la conductivité avec le champ électrique. Ces résultats confortent donc les conclusions de l'expérience 2.

4.1.2.3 Présentation de l'expérience 3 : Mesure de courant – Irradiation fort flux et très courts temps

La Figure 4.71 représente l'évolution de la densité de courant incident J_e et de la densité de courant mesuré J_{exp} en fonction du temps d'irradiation. L'échantillonnage de la mesure est très précis (0,1 seconde), ce qui permet de voir avec précision les évolutions de courant en début d'irradiation et de relaxation. A noter : cette expérience confirme un piégeage très rapide des électrons et des trous dans le Kapton® HN (chapitre 3).

L'expérience 3 est utilisée pour déterminer le coefficient φ_0 présent dans l'équation (2.3.1.3.2.1), du chapitre 2, de la partie (2.3.1.3.2). Nous verrons, dans la partie 4.2.1.2, qu'il est seulement possible de donner un minorant de ce coefficient et qu'il n'est pas possible de le déterminer avec précision. Dans cette expérience, la densité de courant du faisceau incident utilisée est plus grande que dans les autres expériences. Cela permet, dans un premier temps, d'obtenir un courant mesuré plus grand et moins soumis aux erreurs de mesure des instruments. Dans un deuxième temps, cela permet de diminuer l'incertitude sur le calcul du minorant de φ_0 . En effet, φ_0 est lié à la création de paires électron-trou, suite à l'interaction d'électrons incidents

avec le matériau. La probabilité/statistique d'interaction augmente si le flux d'électrons incidents augmente.

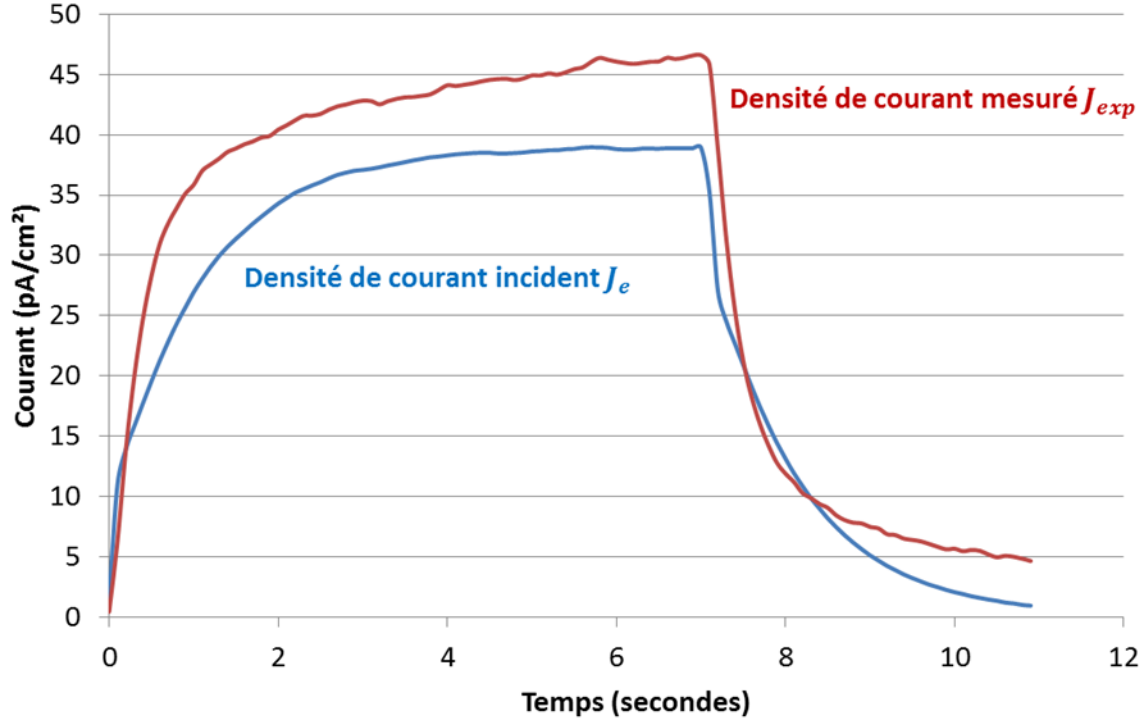


Figure 4.71 : Courants mesurés en fonction du temps d'irradiation. Le courant incident est le courant d'électrons. Il vaut 37pA/cm². Le courant mesuré vaut 46pA/cm². L'échantillon irradié mesure 50µm et une différence de potentiel de -1000V est appliquée sur cet échantillon.

L'expérience 4 sera présentée et analysée dans la partie 4.2.2.

4.1.2.4 Analyse de l'effet du champ électrique en utilisant les expériences 1 et 2

Sur la base des mesures de conductivité des expériences 1 et 2, il est clair que cette dernière dépend du champ électrique. Dans cette section, je vais analyser les paramètres dont la conductivité dépend, ce qui permettra de supposer que ces derniers dépendent du champ électrique. Pour cela, écrivons l'expression analytique de la conductivité, qui dépend, par définition, de la mobilité des charges et de leurs densités :

$$\sigma = e(n \times \mu_n + p \times \mu_p) \quad (4.1.2.4.1)$$

D'après le système d'équations sur lequel THEMIS est basé, présenté dans le chapitre 2 (équations (2.4.2.1) à (2.4.2.4), partie 2.4.2), les densités d'électrons et de trous dépendent de nombreux paramètres, parfois de manière non linéaire : la génération de paires électron-trou, le

piégeage/dé-piégeage des charges, la recombinaison et les gradients de courants. Ce système est composé de 4 équations non linéaires d'ordre 1. Cela signifie qu'il n'est pas possible d'obtenir une équation simple et analytique des densités de charges et de la conductivité, en fonction du temps d'irradiation et de la profondeur du matériau dans le cas général. Pour parvenir à une forme analytique simple, nous utilisons les conditions des expériences 1 et 2. Avec des configurations semblables à ceux deux expériences, plusieurs termes de ce système peuvent être négligés :

- Les gradients de courants (∇I) : Etant donné que le profil de génération est uniforme dans le volume (Figure 4.72), nous supposons que les densités de charges sont quasiment uniformes dans le volume (Figure 4.73). n et p sont quasiment constantes, donc ∇n et ∇p sont très petites. Sur des échelles de temps très courts, cette uniformité est conservée car les charges sont peu mobiles : les électrons et les trous se piègent très rapidement dans le Kapton® HN (chapitre 3, partie 3.2.3). Ajouté à ceci, un champ électrique macroscopique uniforme est appliqué sur le matériau. Son gradient est nul $\nabla E = 0$. Puisque les gradients de courants dépendent linéairement de ∇E , ∇n et ∇p , ils sont très faibles et peuvent être négligés par rapport au terme de génération. Ces termes sont représentés sur la Figure 4.74 en fonction de la profondeur du matériau, 25 secondes après le début de l'irradiation, relatif à l'expérience 2. Sur cette figure, le terme de génération (courbe bleue claire), le terme de piégeage des électrons (courbe bleue foncée) et le terme de piégeage des trous (courbe rouge) sont quasiment superposés et valent tous approximativement $10^{18} \text{ m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. Ils sont plus de 4 ordres de grandeur supérieurs aux gradients de courants.
- Les termes de recombinaison ($\alpha_1 n p_t, \alpha_2 n p, \alpha_3 n_t p$) : En raison des faibles flux incidents en électrons et d'une échelle de temps d'irradiation courts (moins d'une minute), les densités des électrons et des trous sont relativement faibles. Ces faibles densités, couplées à un coefficient de recombinaison réduit, conduisent à des termes de recombinaison négligeables par rapport aux autres termes (taux de génération et taux de piégeage des charges). Sur la Figure 4.74, le taux de recombinaison entre les électrons et les trous est ainsi plus de 5 ordres de grandeurs en dessous des taux de génération et de piégeage des charges.
- L'implantation des électrons : Le flux d'électrons est traversant, car l'énergie du faisceau est grande et l'épaisseur du matériau fine. Il y a une forte génération, mais très peu de déposition d'électrons dans le matériau. L'implantation est plus de 6 ordres de grandeur en dessous du terme de génération (Figure 4.74).
- Les termes de dé-piégeage : Des expériences menées à l'ONERA [80] ont montré que les électrons sont piégés de manière permanente. Leur taux de dé-piégeage est considéré

comme étant nul. Le taux de dé-piégeage des trous est 3 ordres de grandeurs en dessous des termes de génération et de piégeage des électrons et des trous, en raison de la faible densité de trous piégés (Figure 4.74).

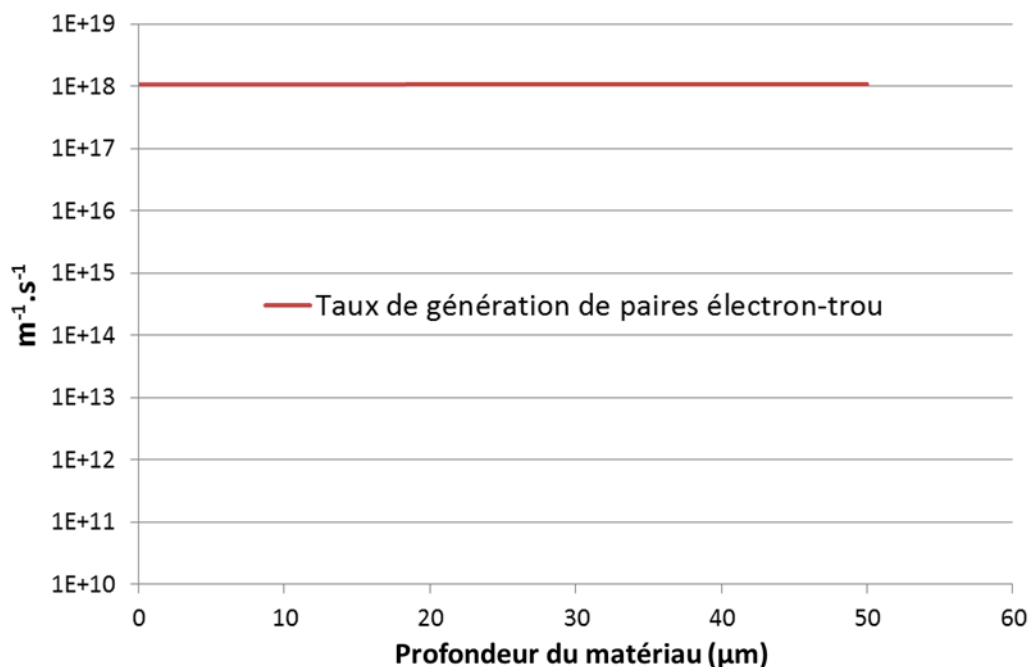


Figure 4.72 : Taux de génération de paires électron-trou en fonction de la profondeur du matériau.

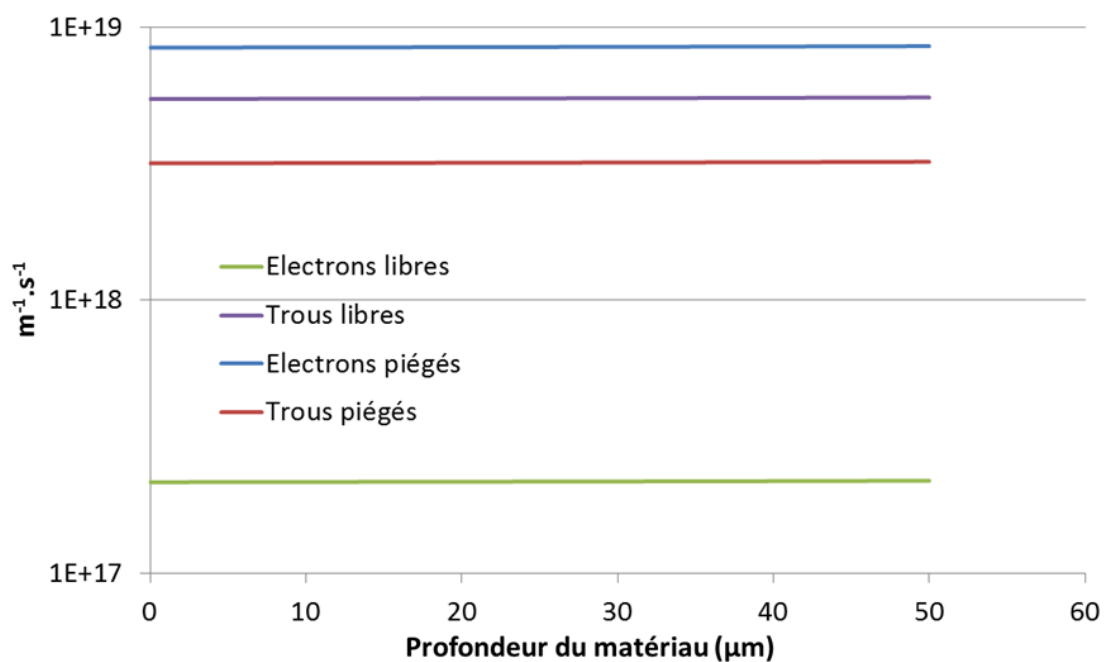


Figure 4.73 : Densités des électrons et trous libres/piégés après 5 secondes d'irradiation.

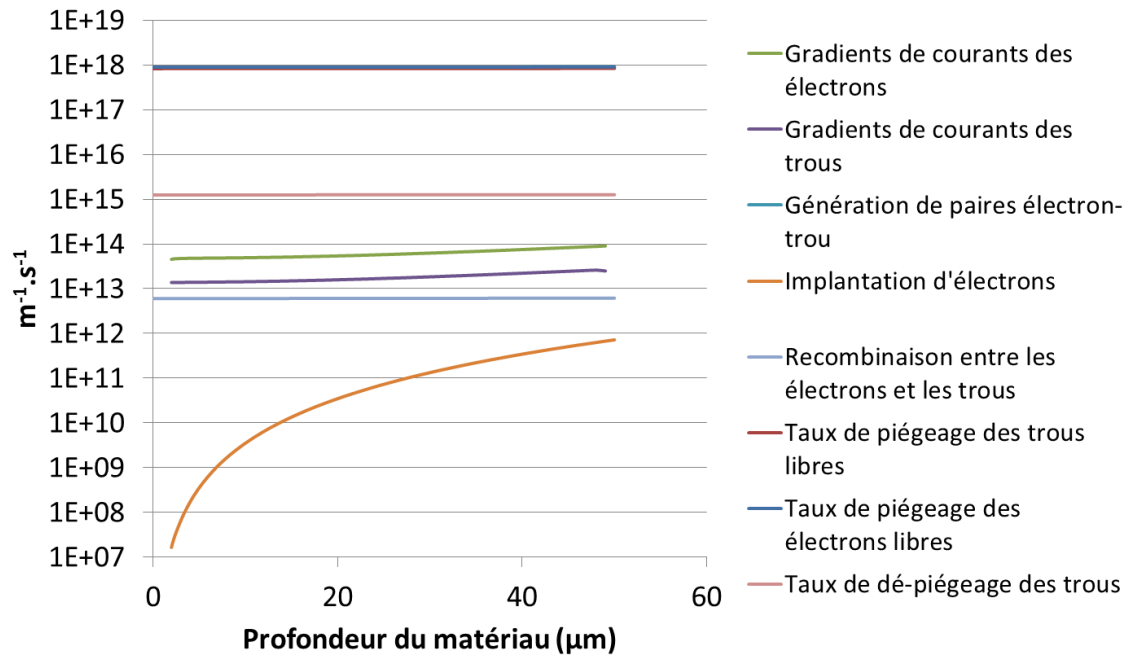


Figure 4.74 : Représentation des différents termes des équations de l'interaction électron-matière et du transport de charges sur lesquels THEMIS est basé, 25 secondes après le début de l'irradiation, pour l'expérience 1.

A la lumière de ces 4 hypothèses, les gradients de courants, les termes de recombinaison, le terme d'implantation des électrons et les termes de dé-piégeage des charges sont négligeables par rapport aux autres termes du système d'équations sur lequel THEMIS est basé. Ce système se simplifie de la manière suivante :

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = g(x, t) - \frac{n}{\tau_n} \quad (4.1.2.4.2)$$

$$\frac{\partial n_t(x, t)}{\partial t} = \frac{n}{\tau_n} \quad (4.1.2.4.3)$$

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = g(x, t) - \frac{p}{\tau_p} \quad (4.1.2.4.4)$$

$$\frac{\partial p_t(x, t)}{\partial t} = \frac{p}{\tau_p} \quad (4.1.2.4.5)$$

Les équations (4.1.2.4.2) à (4.1.2.4.5) possèdent une solution analytique, identique pour $n(x, t)$ et $p(x, t)$. La solution générale de $n(x, t)$ est une solution d'équation différentielle linéaire d'ordre 1 :

$$n(x, t) \approx g(x, t)\tau_n \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_n}}\right) \quad (4.1.2.4.6)$$

La conductivité, qui est calculée avec l'équation (4.1.2.4.1), se développe en utilisant l'équation (4.1.2.4.6) :

$$\sigma \approx eg(x, t) \left(\tau_n \mu_n \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_n}}\right) + \tau_p \mu_p \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_p}}\right) \right) \quad (4.1.2.4.7)$$

Remarque : pour obtenir l'équation (4.1.2.4.7), nous avons fait l'hypothèse de temps d'irradiation courts. Cette hypothèse permet de simplifier les équations du système d'équations sur lequel THEMIS est basé, et met en évidence quel(s) terme(s) dépend du champ électrique. Cependant, il est important de noter que ces termes sont toujours dépendants du champ électrique, même pour de longs temps d'irradiation.

D'après les Figure 4.68 et 4.69, la conductivité est dépendante du champ électrique. Cela signifie que dans l'équation (4.1.2.4.7), $g(x, t)$, μ_n , μ_p ou l'ensemble de ces termes, sont dépendants du champ électrique. Par hypothèse, nous supposons que le champ électrique n'a pas d'effet sur le piégeage des charges. Après une analyse détaillée dans la littérature (chapitre 2, partie 2.3.1.3.2), il s'avère que 2 théories sont susceptibles d'expliquer cette dépendance :

- La première est la théorie *du dé-piégeage de charges assisté par effet du champ électrique pour les pièges peu profonds*. Cette théorie comprend l'effet de Poole-Frenkel [11] et l'effet tunnel. L'effet Poole-Frenkel caractérise un abaissement de la barrière de potentiel du piège. Ces effets sont étroitement liés et suivent tous les deux une loi de type Poole-Frenkel. Cela signifie que le dé-piégeage des charges, en provenance des pièges peu profonds, dépend de manière exponentielle de la racine carrée du champ électrique (chapitre 2, section 2.3.1.3.1). La loi de type Poole-Frenkel modélise ces effets par une dépendance du champ électrique sur la mobilité effective des charges : $\mu_n = \mu_n(E)$ et $\mu_p = \mu_p(E)$ (A. Tyutnev and V. Saenko [7]). Ce sera discuté dans la section 4.2.1.1.

- La deuxième est la théorie d’Onsager [2]. Elle suppose que le taux de génération des charges $g(x, t)$ dépend de manière exponentielle de la température et du champ électrique : $g(x, t) = g(x, t, E, T)$. Cela sera discuté dans la section 4.2.1.2.

Nous verrons dans la partie 4.2.2, que le temps de dé-piégeage τ_t des charges en provenance des pièges profonds dépend également du champ électrique, par abaissement de la barrière de potentiel (effet Poole-Frenkel). L’effet tunnel n’existe pas pour les pièges profonds, trop éloignés des bandes de conduction/valence. Cet effet requiert de faibles distances énergétiques pour exister. Le temps de dé-piégeage τ_t n’est pas présent dans l’équation (4.1.2.4.7) de la conductivité, car nous avons travaillé avec des temps très courts. Sur cette échelle de temps, le dé-piégeage peut être négligé par rapport au terme de piégeage. Pour des temps courts, le dé-piégeage des charges a très peu d’influence sur la conductivité, bien qu’il soit existant. Pour des temps plus longs, lorsque le nombre de charges piégées augmente, le taux de dé-piégeage des charges en provenance des pièges profonds devient donc bien plus important. Il est alors nécessaire de prendre en compte l’influence du champ électrique sur ce taux de dé-piégeage, en utilisant une loi de type Poole-Frenkel. Cet effet sera validé en utilisant la 4^{ème} expérience.

4.2 Analyse et prise en compte de l’effet du champ électrique dans le modèle THEMIS sur le Kapton® HN

Dans la partie précédente, j’ai mis en avant les paramètres susceptibles de dépendre du champ électrique, et les théories qui peuvent expliquer cette dépendance. Dans cette partie, ces théories sont intégrées au modèle THEMIS et analysées en utilisant les quatre expériences.

Dans la partie 4.2.1, les étapes qui ont permis de déterminer les paramètres de la loi de Poole-Frenkel qui transcrit le *dé-piégeage de charges assisté par effet du champ électrique pour les pièges peu profonds* et de la théorie d’Onsager sont détaillées. En intégrant ces deux théories au modèle implémenté dans THEMIS, le modèle physique utilisé est validé par comparaison des résultats numériques aux résultats expérimentaux de conductivité.

Dans la partie 4.2.2, la loi de Poole-Frenkel qui gouverne le *dé-piégeage des charges assisté par effet du champ électrique pour les pièges profonds* est analysée. Cet effet est validé par comparaisons des résultats numériques aux résultats expérimentaux de potentiel de surface, sous irradiation représentative des conditions spatiales.

4.2.1 Effets du champ électrique sur la génération de paires électron-trou et sur les charges piégées peu profondément : application à la conductivité

4.2.1.1 Loi de type Poole-Frenkel : détermination de β

Dans cette section, les données de la Figure 4.68 (expérience 1) sont analysées afin d'étudier une éventuelle influence du champ électrique sur les processus de dé-piégeage, en provenance des pièges peu profonds. Pour exclure le mécanisme d'Onsager, l'analyse se porte sur la phase de relaxation. Pendant cette phase, l'irradiation est arrêtée, donc $g(x, t, T, E) = 0$.

Dans la littérature, il est indiqué que l'effet tunnel et l'effet Poole-Frenkel agissent sur le dé-piégeage des charges [12]. Sous l'influence d'un champ électrique externe, le taux de dé-piégeage des électrons et des trous depuis les pièges peu profonds augmente. Ces phénomènes conduisent à une augmentation de la conductivité. Les électrons et trous dé-piégés sont rapidement piégés à nouveau dans les pièges peu profonds. Un équilibre s'établit entre le dé-piégeage (gouverné par le champ électrique) et le piégeage des charges. D'après A. Tyutnev, V. Saenko *et al* [7], cet équilibre est modélisé par une loi de type Poole-Frenkel, qui exprime la mobilité effective des électrons et des trous en fonction du champ électrique :

$$\begin{cases} \ln(\mu_n) = \beta \times E^{1/2} + \ln(\mu_{n0}) \\ \ln(\mu_p) = \beta \times E^{1/2} + \ln(\mu_{p0}) \end{cases} \quad (4.2.1.1.1)$$

μ_{n0} et μ_{p0} sont les mobilités à champ électrique nul. $\beta \times E^{1/2}$ traduit l'influence du champ électrique sur la probabilité de dé-piégeage par effet tunnel et par effet Poole-Frenkel (abaissement de la barrière de potentiel du piège). En supposant que la mobilité effective des électrons et des trous libres soit gouvernée par le champ électrique, l'équation (4.1.2.4.7) de la conductivité devient :

$$\ln(\sigma) = \beta \times E^{1/2} + \ln(\sigma_0) \quad (4.2.1.1.2)$$

Avec σ_0 la conductivité pour un champ électrique externe nul.

- Extraction des paramètres

β est calculé en faisant correspondre les résultats expérimentaux avec l'équation (4.2.1.1.2). Sur la Figure 4.68, en phase de relaxation, trois périodes de temps différentes de 60 secondes chacune ont été sélectionnées : 32^{ème} à 33^{ème} minute, 40^{ème} à 41^{ème} minute et 60^{ème} à 61^{ème} minute. La conductivité est moyennée sur ces périodes de temps pour chaque champ électrique.

Les résultats sont affichés sur la Figure 4.75. La Figure 4.75 représente le logarithme naturel de la conductivité σ en fonction de la racine carrée du champ électrique $\sqrt{E}$. Par régression linéaire, des fonctions affines ont été obtenues, ce qui suggère fortement que la conductivité, et donc la mobilité des électrons et des trous libres, sont gouvernées par une loi de type Poole-Frenkel. La régression linéaire est représentée sur la Figure 4.75, illustrée par les lignes bleues, noires et rouges. La valeur des pentes correspond à la valeur de β . Les 3 pentes sont identiques et donnent la valeur de β suivante : $\beta = 3 \times 10^{-4} \text{ m}^{1/2} \cdot \text{V}^{-1/2}$. Il est intéressant de noter que la valeur de β est 5 fois plus petite que la valeur théorique de $\beta_{PF} = 15 \times 10^{-4}$, présentée dans le chapitre 2, dans la partie 2.3.1.3.2. Cela laisse supposer que pour les pièges peu profonds, l'effet tunnel prédomine au regard de l'effet Poole-Frenkel. Physiquement, cela suggérerait que le dépiégeage des charges par abaissement de la barrière de potentiel est moins influent que le dépiégeage par effet tunnel.

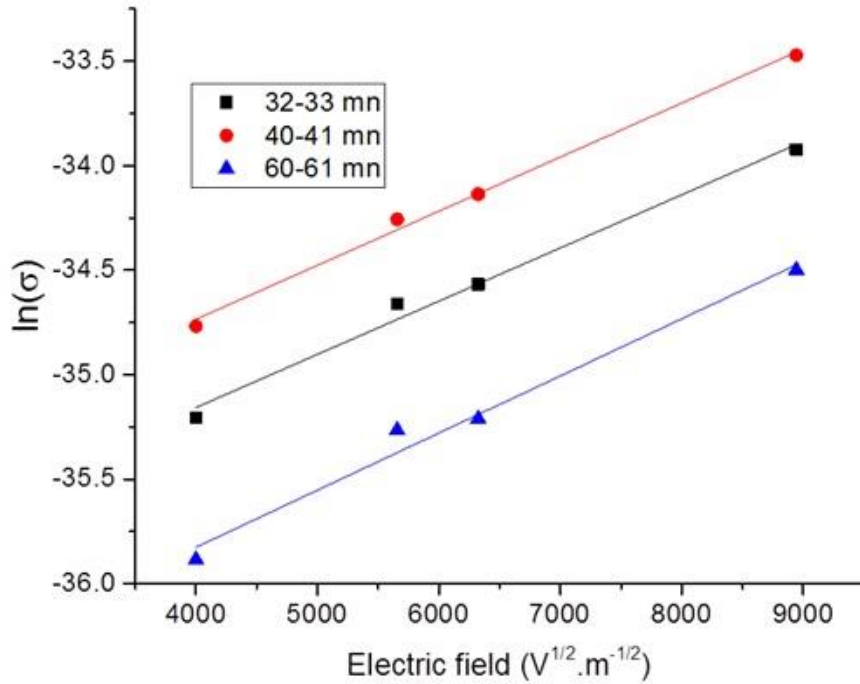


Figure 4.75 : Tracé du logarithme naturel de la conductivité en fonction de la racine carrée du champ électrique. La conductivité est moyennée pour chaque champ électrique sur trois périodes de temps différentes, de 60 secondes chacune : 32^{ème} à 33^{ème} minute, 40^{ème} à 41^{ème} minute et 60^{ème} à 61^{ème} minute, après que la relaxation ait débuté.

4.2.1.2 Théorie d'Onsager : détermination de r_0 et φ_0

La théorie d'Onsager considère que le taux de génération des paires électron-trou $g(x, t)$ dépend de la température et du champ électrique $g(x, t) = g(x, t, T, E)$. Comme ceci a déjà été spécifié dans le chapitre 2 (partie (2.3.1.3.2)), cette dépendance est contrôlée par un facteur nommé $\varphi(T, E)$, qui donne la probabilité qu'un électron thermalisé échappe à la

recombinaison avec son ion parent. Cette probabilité dépend du champ électrique et de la température. De ce fait, il est nécessaire d'ajouter ce facteur au taux de génération des électrons et des trous : $g(x, t, T, E) = \varphi(T, E) \times g(x, t)$. Initialement, l'équation correspondant à $\varphi(T, E)$, trouvée par L. Onsager [2], est la suivante :

$$\varphi(T, E) = \varphi_0 \frac{kT}{eEr_0} e^{\frac{-e^2}{4\pi\kappa\epsilon_0 k_b T r_0}} e^{\frac{-eEr_0}{kT}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{A^m}{m!} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=m+n+1}^{\infty} \left(\frac{eEr_0}{kT} \right)^l \frac{1}{l!} \quad (4.2.1.2.1)$$

Avec φ_0 le rendement de production de paires d'ions thermalisés par électron absorbé. Pour rappel, r_c et r_0 sont des distances caractéristiques. r_0 est le rayon de thermalisation. C'est la distance caractéristique à laquelle l'électron s'éloigne de son atome parent avant qu'il y ait recombinaison géminée ou extraction définitive. k_b est la constante de Boltzmann. L'expression (4.2.1.2.1) présente plusieurs sommes imbriquées et elle est très coûteuse en temps de calcul. Il n'est pas recommandé de l'implémenter dans un code numérique tel que THEMIS. Pour cette raison, l'expression analytique trouvée par A. Tyutnev, V. Saenko *et al* [7], présentée dans le chapitre 2 (partie (2.3.1.3.2)), a été choisie. Pour s'assurer de sa validité, ces 2 expressions ont été comparées sur la Figure 4.76. Cette figure représente (échelle des ordonnées de gauche) les 2 expressions de $\varphi(T, E)$, normalisées par rapport à φ_0 , en fonction du champ électrique, pour deux r_0 différents, et pour une température fixe de 300 K. Cette figure représente également l'erreur relative (échelle des ordonnées de droite) entre les 2 expressions de $\varphi(T, E)$, pour le rayon de thermalisation $r_0 = 14 \text{ nm}$. L'erreur relative du rayon de thermalisation $r_0 = 22 \text{ nm}$ est plus faible que celle du rayon $r_0 = 14 \text{ nm}$. L'erreur relative de $r_0 = 14 \text{ nm}$ est très basse : le maximum est de 3.5% pour un champ électrique légèrement plus faible que 10^7 V/m . L'erreur relative n'est pas tracée pour d'autres r_0 , mais elle reste du même ordre pour des r_0 plus petits, tels que $r_0 = 5 \text{ nm}$. Ceci montre que les deux équations donnent des résultats très proches, ce qui confirme l'utilisation de l'équation de A. Tyutnev.

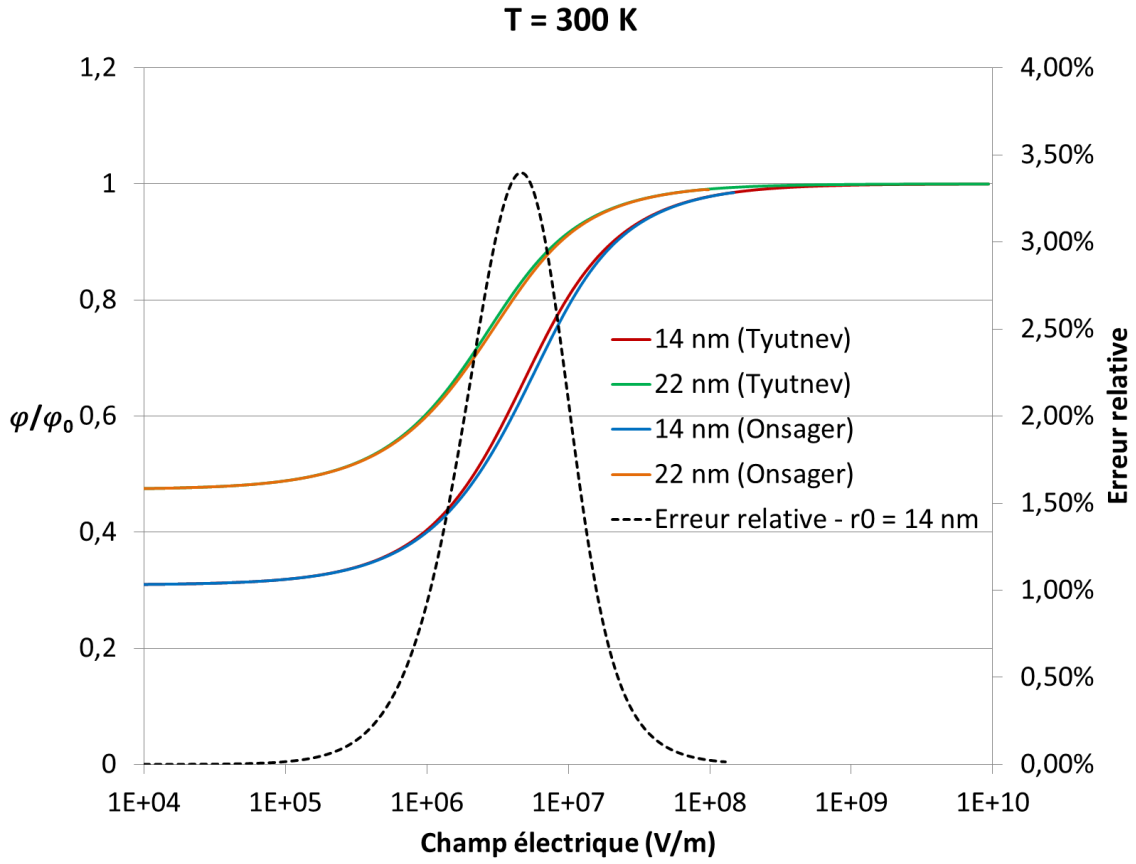


Figure 4.76 : Comparaison de l'équation originelle d'Onsager avec l'équation d'Onsager modifiée par A. Tyutnev, pour une température de 300 K en fonction du champ électrique et du rayon de thermalisation r_0 .

D'après la définition de la théorie d'Onsager, l'équation de la conductivité (4.1.2.4.7) est modifiée par le facteur $\varphi(T, E)$:

$$\sigma \approx e\varphi(T, E)g(x, t) \left(\tau_n \mu_n \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_n}} \right) + \tau_p \mu_p \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_p}} \right) \right) \quad (4.2.1.2.2)$$

A l'aide de l'équation précédente, il est possible d'estimer les paramètres r_0 et φ_0 . Le paramètre r_0 est d'abord étudié, puis φ_0 , par comparaisons croisées de mesures expérimentales et numériques.

a) Rayon de thermalisation r_0

L'objectif est de savoir si la théorie d'Onsager peut expliquer la dépendance en champ électrique de la conductivité (Figure 4.68-4.69) et de déterminer la valeur du rayon de thermalisation r_0 qui détermine l'expression de $\varphi(T, E)$. En supposant que la mobilité des charges ne dépende pas du champ électrique, σ doit avoir le même comportement que $\varphi(T, E)$

d'après l'équation (4.2.1.2.2) : $\partial\sigma/\partial E = \partial\phi/\partial E$. Sur la Figure 4.77 sont comparées, en fonction du champ électrique, les conductivités de la Figure 4.68 (expérience 1) et de la Figure 4.69 (expérience 2) avec l'équation (2.3.1.3.2.1) présentée dans le chapitre 2 (partie (2.3.1.3.2)). Les conductivités de la Figure 4.68 sont moyennées sur les 30 premières secondes après le début de l'irradiation. Toutes les conductivités sont ensuite normalisées par la conductivité qui correspond au champ électrique $E = 1,6 \times 10^7$ V/m. L'équation (2.3.1.3.2.1) est aussi normalisée avec le même champ électrique. J'ai fait correspondre les données expérimentales de la Figure 4.68 et de la Figure 4.69 avec l'équation (2.3.1.3.2.1), en faisant varier le rayon de thermalisation : $r_0 = 7$ nm, $r_0 = 15$ nm et $r_0 = 30$ nm, pour satisfaire la relation $\partial\sigma/\partial E = \partial\phi/\partial E$. La meilleure correspondance, qui n'est toutefois pas excellente, est celle liée à un rayon de thermalisation de 7 nm. Pour des champs électriques plus grands, il est clair que la conductivité ne suit pas la loi d'Onsager. Cela signifie que la mobilité des charges dépend du champ électrique. Pour pallier à ceci, j'introduis dans la section suivante les mécanismes de *dépiégeage assistés par effet du champ électrique*, en provenance des pièges peu profonds, avec une loi de type Poole-Frenkel.

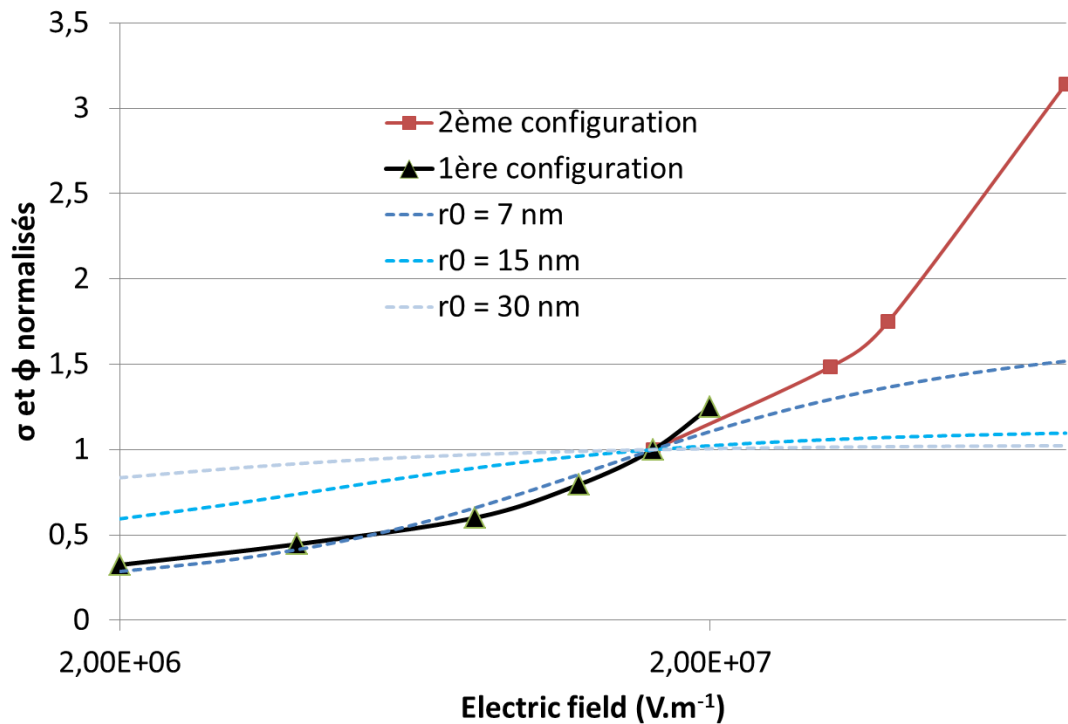


Figure 4.77 : Comparaison entre les mesures de conductivité de la Figure 4.68 (expérience 1) et de la Figure 4.69 (expérience 2) en utilisant l'équation de A. Tyutnev, avec trois rayons de thermalisation différents : $r_0 = 7$ nm, $r_0 = 15$ nm et $r_0 = 30$ nm.

b) Rendement de production de paires d'ions thermalisés par électron absorbé : ϕ_0

Pour calculer un minorant de la valeur de φ_0 , l'expérience 3 est spécifiquement utilisée. Ce minorant est obtenu en utilisant 2 densités de courants différentes : J_{exp} et J_{SP} . J_{SP} est la densité de courant volumique Sans Piégeage. C'est une densité de courant hypothétique, qui n'est jamais mesurée, et qui suppose que le piégeage des charges n'a pas lieu. Cette hypothèse signifie que sous irradiation, lorsque les électrons et les trous sont créés par ionisation, ils ne se piègeraient pas. Leurs densités ne feraient qu'augmenter linéairement et le courant également. Par conséquent, $J_{SP} > J_{exp}$, puisque la densité de courant mesurée J_{exp} (Figure 4.71) dépend du piégeage. J_{SP} dépend de φ_0 , ce qui permet en utilisant l'inégalité $J_{SP} > J_{exp}$, de déduire un minorant de φ_0 . Ce courant dépend de la mobilité des charges libres, de leurs densités et du champ électrique, par une loi de type Poole-Frenkel :

$$J_{SP} = e \left(\mu_{n_0} n + \mu_{p_0} p \right) \exp(\beta \sqrt{E}) E \quad (4.2.1.2.3)$$

En supposant qu'il n'y a aucun piégeage des charges dans le matériau, les densités de charges sont directement proportionnelles au terme de génération :

$$n(x, t, T, E) = p(x, t, T, E) = t \times g(x, t, T, E) \quad (4.2.1.2.4)$$

Après 7 secondes d'irradiation (temps correspondant à l'expérience), le nombre de charges libres générées dans le volume vaut 7 fois le terme de génération :

$$J_{SP} = e \times 7 \times g(x, T, E) (\mu_n + \mu_p) \exp(\beta \sqrt{E}) E \quad (4.2.1.2.5)$$

On suppose que les électrons sont 100 fois plus mobiles que les trous :

$$J_{SP} \approx e \times 7 \times g(x, T, E) \mu_n \exp(\beta \sqrt{E}) E \quad (4.2.1.2.6)$$

Le courant mesuré J_{exp} , qui est égal au courant volumique, prend nécessairement en compte le piégeage des charges dans le matériau. Il constitue un minorant du courant calculé dans l'équation (4.2.1.2.6), qui ne considère pas de piégeage :

$$J_{SP} > J_{exp} \quad (4.2.1.2.7)$$

En remplaçant :

$$e \times 7 \times \varphi_0 \exp\left(\frac{r_c \exp(-\zeta) - 1}{\zeta}\right) \times \frac{J_0 \text{Dose}(x, W)}{3eE_g} \mu_n \exp(\beta\sqrt{E}) E > J_{exp} \quad (4.2.1.2.8)$$

$$\varphi_0 > \frac{3E_g J_{exp}}{\mu_n \exp(\beta\sqrt{E}) E \times J_0 \times 7 \times \text{Dose}(x, W) \times \exp\left(\frac{r_c \exp(-\zeta) - 1}{\zeta}\right)} \quad (4.2.1.2.9)$$

Après calcul :

$$\varphi_0 > 0,01 \quad (4.2.1.2.10)$$

Comme je l'ai expliqué dans le chapitre 3, la valeur de μ_n est sujette à des incertitudes. Les valeurs de β et r_0 comportent également des incertitudes. Elles proviennent d'éventuelles erreurs de mesures, d'une statistique de champs électriques appliqués assez basse (4 champs électriques seulement pour l'expérience 1 et 6 pour l'expérience 2), d'écarts relatifs non nuls entre les résultats expérimentaux et le modèle THEMIS. Ces incertitudes viennent aussi, plus simplement, de la difficulté d'observation directe de phénomènes quantiques et statistiques qui se déroulent à des échelles plus petites que l'échelle atomique. Il est important de noter que ces incertitudes existent, ce qui signifie que le minorant de φ_0 , et donc φ_0 , sont sujets à des imprécisions. Pour le Kapton® HN, la valeur de φ_0 a été déterminée avec plus de précision en minimisant l'erreur entre les simulations et les résultats expérimentaux de chacune des expériences présentées en début de chapitre (expériences 1 à 4), ainsi que l'expérience 4, présentée dans la partie 4.2.2.2.

4.2.1.3 Prise en compte de la théorie d'Onsager et de la loi de type Poole-Frenkel : application à la conductivité

Dans les deux sections précédentes, j'ai décrit l'effet du champ électrique sur la génération de paires électron-trou et sur les phénomènes de dé-piégeage, en provenance des pièges peu profonds. Dans cette section, les deux mécanismes sont associés dans le modèle THEMIS afin de déterminer s'ils expliquent les résultats expérimentaux. Pour cela, les données de la Figure 4.69 (expérience 2) sont utilisées. Dans un premier temps, je représente les résultats expérimentaux en utilisant seulement la loi de type Poole-Frenkel. La théorie d'Onsager est écartée. Les résultats sont affichés sur la Figure 4.78. La Figure 4.78 affiche les mesures de conductivité en fonction du temps d'irradiation pour 6 potentiels différents appliqués sur l'électrode 1 (Figure 4.67) : -100 V, -200 V, -400 V, -600 V, -800 V et -1000 V. Elle affiche aussi les résultats numériques obtenus pour chacun de ces champs. Les résultats expérimentaux

sont représentés par des traits continus, tandis que les résultats numériques sont représentés par des traits discontinus. L'incertitude sur les mesures est réduite en moyennant la conductivité sur le plateau (entre la 10^{ème} et 30^{ème} seconde). En comparant les conductivités moyennées des résultats expérimentaux aux résultats numériques, on constate que les écarts relatifs entre résultats expérimentaux et résultats numériques se situent entre 5% et 20%, sur la gamme de champs électriques choisis. L'écart le plus important a lieu pour le champ électrique le plus faible, qui correspond à une différence de potentiel de -100 V sur l'échantillon (courbe bleue). Pour cette mesure de courant, le champ électrique est très faible et les valeurs de courant très bruitées, ce qui explique en partie cet écart. Pour les champs électriques plus importants, l'écart relatif est réduit, car les mesures sont moins bruitées. L'écart le plus faible a lieu pour le champ électrique le plus fort (courbe orange). Ces résultats sont très encourageants et montrent qu'une loi de type Poole-Frenkel semble représentative du comportement des charges sous l'influence d'un champ électrique.

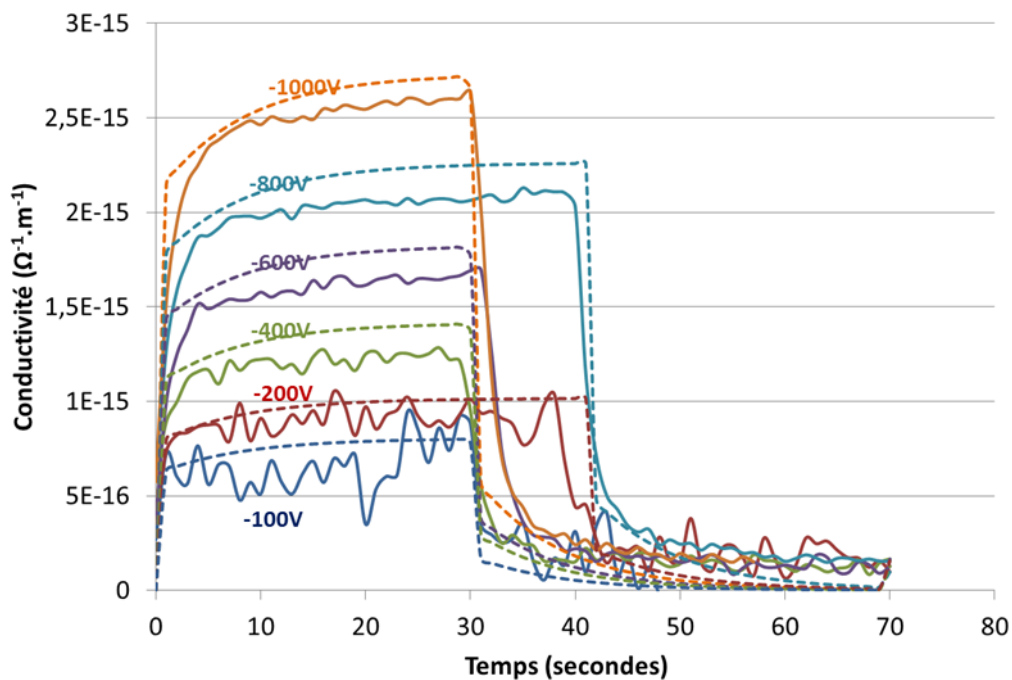


Figure 4.78 : Niveaux de conductivités calculés par mesures expérimentales du courant (traits continus). Les résultats sont ceux de la Figure 4.69. Les résultats numériques (traits discontinus) sont obtenus en implémentant dans le modèle THEMIS l'effet du champ électrique sur le dé-piégeage des charges en provenance des pièges peu profonds.

Sur la Figure 4.79, les résultats expérimentaux de la conductivité sont comparés aux résultats du modèle THEMIS, en prenant également en compte l'effet d'Onsager. Les résultats sont légèrement meilleurs que ceux affichés sur la Figure 4.78. En ajoutant l'effet d'Onsager, il a été possible de diminuer l'écart relatif entre résultats expérimentaux et numériques, à quasiment 0% pour les potentiels -400 V, -600 V, -800 V et -1000 V. Pour les potentiels -100 V et -200 V, les

erreurs sont attribuées au bruit de mesure, car les champs électriques appliqués et les courants mesurés sont trop faibles. Malgré cela, l'effet d'Onsager n'est pas aussi important que ce que nous imaginions initialement. Cela suggère qu'à température ambiante, l'effet d'Onsager est assez faible pour le Kapton® HN. Des travaux supplémentaires doivent être envisagés pour étudier l'influence de la température sur l'interaction électron-matière et le transport de charges des polymères sous irradiation.

Pour aller plus loin et pour illustrer la dépendance de la conductivité par rapport au champ électrique avec une loi de type Poole-Frenkel ($\exp(\beta\sqrt{E})$), les données de l'expérience 1 et 2 ont été rassemblées, de la même manière que sur la Figure 4.77. Sur la Figure 4.80 sont comparées l'équation $\exp(\beta\sqrt{E})$ avec les données de conductivité normalisées. Ces données sont celles de la Figure 4.68 et de la Figure 4.69. Les données sont normalisées avec celles correspondant au champ électrique $E = 1,6 \times 10^7$ V/m. Sur cette figure, différentes valeurs de β ont été utilisées : $\beta = 1 \times 10^{-4} \text{ m}^{1/2}\text{V}^{-1/2}$, $\beta = 3 \times 10^{-4} \text{ m}^{1/2}\text{V}^{-1/2}$ et $\beta = 5 \times 10^{-4} \text{ m}^{1/2}\text{V}^{-1/2}$. Le meilleur accord semble correspondre à $\beta = 3 \times 10^{-4} \text{ m}^{1/2}\text{V}^{-1/2}$, ce qui confirme les données de la Figure 4.75.

Dans cette partie, il a été observé qu'en intégrant l'effet du champ électrique sur le dé-piégeage des charges dans le modèle THEMIS, il était possible de reproduire les données expérimentales à faible et fort champ électrique. Cela signifie que les mécanismes de dé-piégeage assistés par effet du champ électrique (effet tunnel et effet Poole-Frenkel) sont majoritairement responsables du comportement de la conductivité du Kapton® HN.

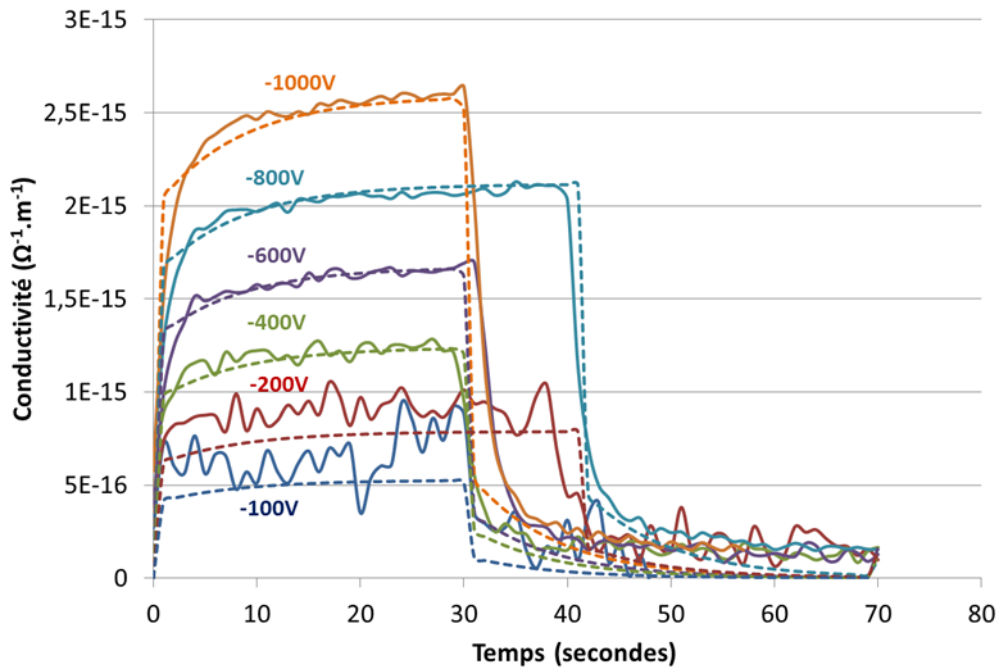


Figure 4.79 : Niveaux de conductivités calculés par mesures expérimentales du courant (traits continus). Les résultats sont ceux de la Figure 4.69. Les résultats numériques (traits discontinus) sont obtenus en implémentant dans le modèle THEMIS l'effet du champ électrique sur le dé-piégeage des charges en provenance des pièges peu profonds, ainsi que l'effet d'Onsager.

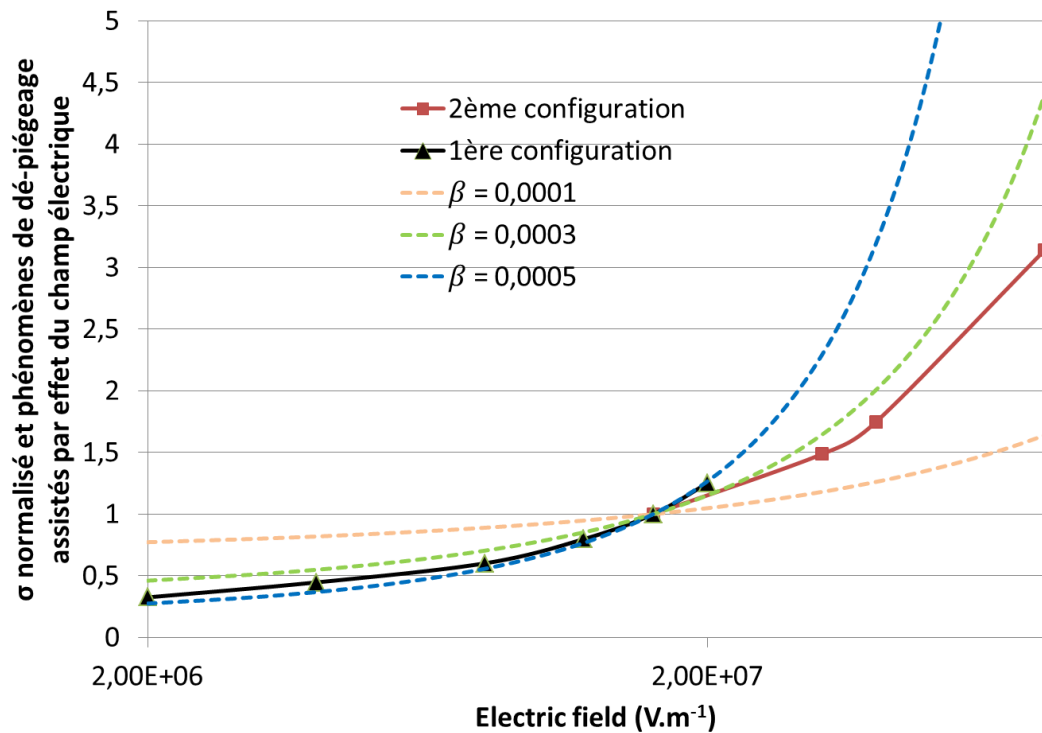


Figure 4.80 : Comparaison des mesures de conductivité de la Figure 4.68 et de la Figure 4.69 avec l'effet du champ électrique sur le dé-piégeage des charges. Trois différents coefficients β sont utilisés : $\beta = 1 \times 10^{-4} m^{1/2} V^{-1/2}$, $\beta = 3 \times 10^{-4} m^{1/2} V^{-1/2}$ et $\beta = 5 \times 10^{-4} m^{1/2} V^{-1/2}$.

4.2.2 Effets du champ électrique sur les pièges profonds : application aux niveaux de potentiel

4.2.2.1 Phénomènes de dé-piégeage des charges en provenance des pièges profonds assistés par effet du champ électrique : théorie de Poole-Frenkel

Dans cette section, j'étends l'analyse de l'effet du champ électrique sur le dé-piégeage des charges en provenance des pièges profonds. Pour les pièges profonds, l'écart énergétique inter-pièges et l'écart énergétique entre le piège et la bande de conduction/valence sont suffisamment importants pour que l'effet tunnel ne soit pas significatif. Le dé-piégeage des charges en provenance des pièges profonds est seulement gouverné par l'abaissement de la barrière de potentiel (effet Poole-Frenkel). Des expériences menées à l'ONERA [80] ont montré que l'influence du champ électrique sur le dé-piégeage des charges des pièges profonds ne concerne que les trous. Ces expériences ont montré que le temps caractéristique de dé-piégeage des électrons est très supérieur à celui des trous. Il est même considéré largement supérieur au temps de vie des satellites en orbite (environ 15 ans). Cela signifie que, lorsqu'un électron est piégé, il y reste de manière permanente et ce, même en présence de forts champs électriques. Ils ne peuvent donc pas rejoindre la bande de conduction et s'écouler dans le matériau. Ce phénomène n'a pas été observé pour les trous. Cela signifie que les forts champs électriques ont une influence sur le temps caractéristique de dé-piégeage des trous. C'est la théorie de Poole-Frenkel, dont les équations sont rappelées ci-dessous, pour les trous :

$$\frac{1}{\tau_{pt}} = \frac{1}{\tau_{pt0}} \times \exp\left(\frac{-eE_g + \beta_{PF}\sqrt{E}k_bT}{k_bT}\right) \quad (4.2.2.1.1)$$

$$\beta_{PF} = \frac{\left(\frac{e^3}{\pi\epsilon_r\epsilon_0}\right)^{1/2}}{k_bT} \quad (4.2.2.1.2)$$

4.2.2.2 Application aux niveaux de potentiel

La Figure 4.81 affiche le potentiel de surface expérimental et numérique du Kapton® HN en fonction du temps d'irradiation, qui correspond à la 4^{ème} expérience. La Figure 4.81 affiche trois courbes. La courbe bleue correspond aux données expérimentales. La courbe rouge correspond aux résultats numériques, quand l'effet d'Onsager (génération des paires électron-trou), l'effet tunnel et l'effet Poole-Frenkel pour les pièges peu profonds (mobilité des charges), sont pris en compte. La courbe verte rassemble l'ensemble des mécanismes, en ajoutant l'effet

Poole-Frenkel pour les pièges profonds (temps de dé-piégeage des trous). La Figure 4.81 montre trois phases pour le potentiel de surface. Dans la première phase (jusqu'à 1200 secondes après le début de l'irradiation), le potentiel de surface augmente rapidement. Dans la deuxième phase (de 1200 secondes à environ 7000 secondes), il diminue lentement. Dans la troisième phase (à partir de 7000 secondes), il subit une diminution brutale à cause de l'arrêt de l'irradiation (phase de relaxation). Ces phases ont déjà été expliquées dans le chapitre 3 (partie 3.2.3). Un rappel, en intégrant l'effet du champ électrique, est fait ci-dessous :

- Dans la première phase, les électrons incidents sont implantés et rapidement piégés dans le volume du matériau. La génération des électrons par ionisation conduit rapidement au piégeage de ces derniers et la densité de trous libres issus du dé-piégeage n'est pas suffisante pour compenser l'implantation. Il en résulte une augmentation du potentiel de surface, donc du champ électrique.
- Dans la deuxième phase, le champ électrique créé par la charge d'espace atteint une valeur suffisante pour que les processus de dé-piégeage des charges piégées (profondes et peu profondes) soient importants. D'autre part, par accumulation des trous dans les pièges, leur taux de dé-piégeage augmente, ce qui conduit à un accroissement du nombre de trous libres. Ce processus conduit à une augmentation de la conductivité effective des trous. Sous l'effet du champ électrique, ils se déplacent en surface, écrantent les charges négatives implantées, se recombinent avec elles et diminuent ainsi le potentiel de surface.
- Dans la troisième phase, l'irradiation est arrêtée. L'implantation électronique par le faisceau de basse énergie est donc stoppée : le potentiel de surface diminue rapidement sous l'effet de la RIC retardée. Sous l'influence du champ électrique lié à la charge d'espace, les trous piégés vont dans la bande de valence et deviennent libres. Ces trous se déplacent en direction de la surface du matériau : le potentiel de surface diminue. Cette diminution est bien plus rapide que dans la seconde phase car le transfert de trous n'est plus comblé par l'implantation d'électrons de basse énergie.

Pour étudier l'influence du champ électrique sur le dé-piégeage des trous en provenance des pièges profonds, je me suis spécifiquement intéressé à la phase de relaxation. Lors de cette phases, il n'y a pas de génération de paires électron-trou, ni d'implantation d'électrons, ce qui permet d'étudier plus facilement l'effet Poole-Frenkel.

Comme la Figure 4.81 le montre, si tous les effets liés au champ électrique, excepté l'influence de ce dernier sur le dé-piégeage des trous en provenance des pièges profonds, sont intégrés dans

le modèle THEMIS, alors l'accord entre les résultats expérimentaux et le modèle THEMIS est peu satisfaisant (courbe rouge et bleue). La diminution du potentiel de surface en phase de relaxation (courbe rouge) est alors plus lente que les données expérimentales (courbe bleue). Lorsque tous les effets du champ électrique sont intégrés dans le modèle THEMIS (cette fois en prenant en compte le dé-piégeage des trous en provenance des pièges profonds), l'accord des résultats expérimentaux avec le modèle THEMIS est bien meilleur (courbe verte et bleue). La Figure 4.82 représente l'erreur relative, en pourcent, entre les résultats expérimentaux (courbe bleue) et les résultats numériques de THEMIS (courbe verte), en fonction du temps d'irradiation. Les erreurs relatives observables sur la Figure 4.82 sont majoritairement en dessous de 10%. Il en existe quelques-unes supérieures à 50%, en début d'irradiation. Un tel écart peut s'expliquer par deux points. 1) Il peut s'agir d'erreurs de mesures liées à la sonde Kelvin, car les niveaux de potentiels sont assez bas en début d'irradiation. 2) Il peut également s'agir de l'émission d'électrons secondaires, depuis la surface du matériau, qui n'est pas prise en compte dans le modèle THEMIS. Cette émission permettrait de diminuer légèrement les niveaux de potentiel rendus par le modèle THEMIS. Les recherches la concernant n'ont pas été entreprises lors de ce travail de doctorat. Notre choix s'est porté sur l'effet du champ électrique.

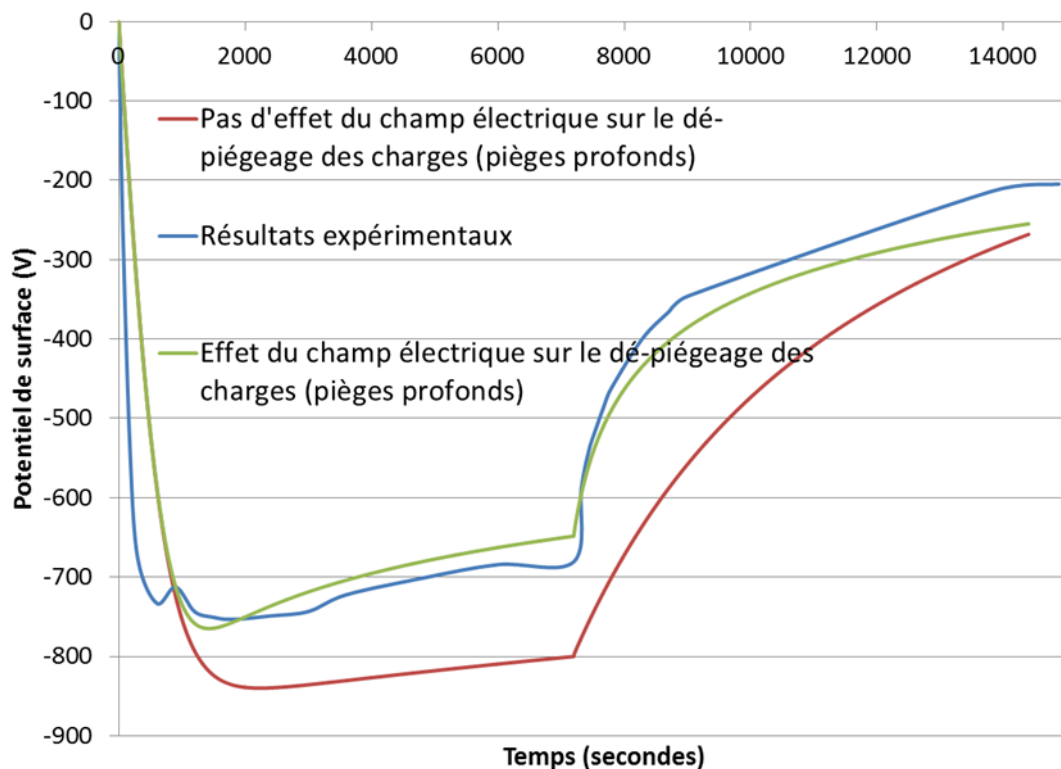


Figure 4.81 : Potentiel de surface expérimental et numérique en fonction du temps d'irradiation pour un échantillon de Kapton® HN de 50 μm sous spectre SIRENE. L'échantillon est irradié pendant 2 heures et relaxé pendant 3 heures.

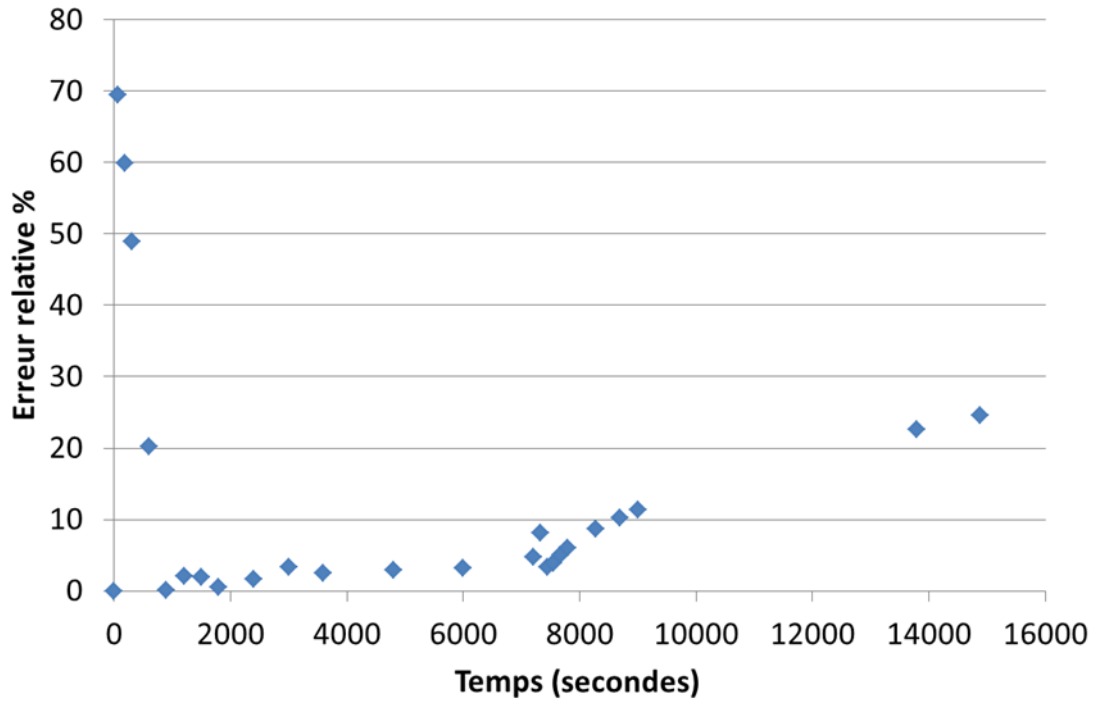


Figure 4.82 : Erreur relative entre les résultats expérimentaux (courbe bleue) et numériques (courbe verte) de la Figure 4.81.

4.3 Evolution de la structure de l'algorithme et du diagramme fonctionnel de THEMIS

4.3.1 Evolution de la structure de l'algorithme de THEMIS

J'ai décrit dans le chapitre 3, partie 3.1.2, la structure de l'algorithme de THEMIS. L'ajout du champ électrique modifie la structure de son algorithme. Rappelons l'équation (2.1.3) du chapitre 2, qui représente la conservation locale de la charge électrique :

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \nabla \Gamma(x, t) = S(x, t) \quad (4.3.1.1)$$

Dans cette équation, les termes source ($S(x, t)$) et de flux ($\nabla \Gamma(x, t)$) sont modifiés en ajoutant l'effet du champ électrique. Le terme source dépend de la génération de paires électron-trou et du temps caractéristique de dé-piégeage des trous. Le terme de flux dépend de la mobilité des charges. Ces trois termes sont modifiés selon les théories d'Onsager et de Poole-Frenkel.

- Génération de paires électron-trou

Sous sa forme discrétisée, le terme de génération de paires électron-trou dépend du champ électrique de la manière suivante :

$$g_i^m = \varphi_0 \exp \left(\frac{r_c}{r_0} \frac{\exp \left(-\frac{eE_{i+1/2}^m r_0}{k_b T} \right) - 1}{\frac{eE_{i+1/2}^m r_0}{k_b T}} \right) \times \frac{j_0 \text{Dose}_i^m(W)}{3eE_g} \quad (4.3.1.2)$$

Rappelons que m et i sont deux indices qui caractérisent respectivement le maillage temporel et spatial, W est l'énergie de l'électron incident, e est la charge d'un électron, j_0 est le flux du faisceau incident et E_g l'énergie de gap du matériau.

- Temps caractéristique de dé-piégeage des trous

En ajoutant l'effet du champ électrique sur le temps caractéristique de dé-piégeage des trous, l'équation (4.2.2.1.1) s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{1}{\tau_{p_{ti}}^m} = \frac{1}{\tau_{p_{t0}}} \times \exp \left(\frac{-eE_g + \beta_{PF} \sqrt{E_{i+1/2}^m k_b T}}{k_b T} \right) \quad (4.3.1.3)$$

- Mobilité des charges

Rappelons que, sous leur forme discrétisée, les flux de conduction des électrons et des trous s'écrivent de la manière suivante :

$$\Gamma_{i-1/2}^{m+1/2} = (\rho \mu E)_{i-1/2}^{m+1/2} + (D \nabla \rho)_{i-1/2}^{m+1/2} \quad (4.3.1.3)$$

$$\Gamma_{i+1/2}^{m+1/2} = (\rho \mu E)_{i+1/2}^{m+1/2} + (D \nabla \rho)_{i+1/2}^{m+1/2} \quad (4.3.1.4)$$

En ajoutant l'effet du champ électrique sur la mobilité des charges, leur écriture est modifiée :

→Trous

$$(\rho \mu(E) E)_{i+1/2}^{m+1/2} = \begin{cases} \rho_i^m \mu(E_{i+1/2}^m) E_{i+1/2}^m & \text{si } \mu E_{i+1/2}^m > 0 \\ \rho_{i+1}^m \mu(E_{i+1/2}^m) E_{i+1/2}^m & \text{si } \mu E_{i+1/2}^m < 0 \end{cases} \quad (4.3.1.5)$$

→Electrons

$$(\rho\mu(E)E)_{i+1/2}^{m+1/2} = \begin{cases} \rho_i^m \mu(E_{i+1/2}^m) E_{i+1/2}^m & \text{si } \mu E_{i+1/2}^m < 0 \\ \rho_{i+1}^m \mu(E_{i+1/2}^m) E_{i+1/2}^m & \text{si } \mu E_{i+1/2}^m > 0 \end{cases} \quad (4.3.1.6)$$

4.3.2 Evolution du diagramme fonctionnel de THEMIS

Le diagramme fonctionnel de THEMIS a été présenté dans la partie 3.1.4 du chapitre 3. Rappelons que ce diagramme présente, pour une itération temporelle donnée, chaque étape permettant de calculer les densités de charges, les niveaux de potentiels et les courants des charges, sur l'ensemble du volume du matériau, en fonction de l'irradiation et des propriétés électriques du matériau. Dans le chapitre 3, il n'incluait pas l'effet du champ électrique. Dans le chapitre 4, je le complète avec cet effet : le calcul du terme de génération de paires électron-trou, du temps caractéristique de dé-piégeage des trous et de la mobilité des charges en fonction du champ électrique, est ajouté. Dans ce diagramme, les parties orangées symbolisent les termes sources, de l'équation 4.3.1.1. Les parties violettes symbolisent les termes en lien avec la conduction des charges. La partie bleue foncée concerne le calcul des potentiels et du champ électrique, nécessaire aux parties orangées et violettes. La partie verte est le cœur de l'algorithme, qui permet d'obtenir les densités de charges et par suite, de calculer les niveaux de potentiels et de champs électriques.

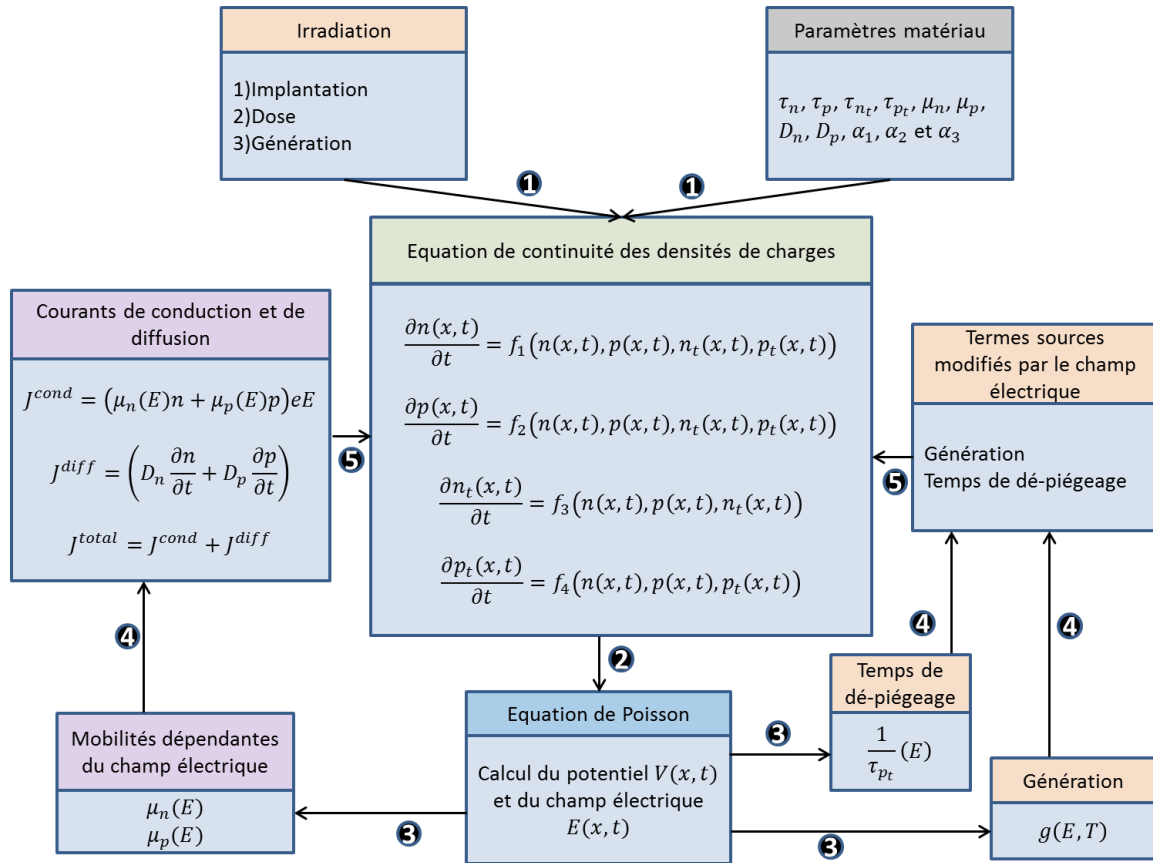


Figure 4.83 : Diagramme fonctionnel de THEMIS

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, j'ai montré l'importance d'intégrer au modèle THEMIS l'effet du champ électrique sur l'interaction électron-matière et le transport des charges, au travers de l'effet d'Onsager, de l'effet tunnel et de l'effet Poole-Frenkel. L'étude s'est portée sur le Kapton® HN, qui a fait l'objet d'un nombre d'études beaucoup plus important et poussé que le Téflon® FEP. Trois effets principaux ont été étudiés et intégrés au modèles THEMIS :

- 1) L'effet du champ électrique sur la génération des paires électron-trou, décrit par la théorie d'Onsager. Cet effet est modélisé par un facteur, représentatif de la probabilité de séparation définitive entre un électron et son atome parent, lorsque de l'énergie est transférée au système électron-atome.
- 2) L'effet du champ électrique sur le dé-piégeage des charges en provenance des pièges peu profonds. Cet effet est décrit par l'effet tunnel (loi de Poole-Frenkel) et l'abaissement de la barrière de potentiel (loi de Poole-Frenkel), qui permettent à la charge de s'extraire plus facilement du piège. Cet effet est modélisé par une mobilité effective des charges dans la bande de conduction/valence.
- 3) L'effet du champ électrique sur le dé-piégeage des charges en provenance des pièges profonds. Cet effet est seulement décrit par un abaissement de la barrière de

potentiel. La densité de ces pièges est trop faible, donc la distance inter-pièges est élevée et ne permet pas le passage des charges d'un piège à l'autre, par effet tunnel. D'autre part, les charges sont trop éloignées des bandes de conduction/valence pour que cet effet ait lieu. De plus, des expériences menées à l'ONERA ont montré que dans le Kapton® HN, cet effet ne vaut que pour les trous.

En conclusion, la bonne concordance entre résultats expérimentaux et résultats numériques suggère que la RIC du Kapton® HN est fortement contrôlée par les effets du champ électrique sur le dé-piégeage des charges (pièges profonds et peu profonds). A température ambiante ($T=300K$), et sur une échelle de champs électriques donnée ($2 \times 10^6 V/m < E < 8 \times 10^7 V/m$), il semble que l'effet d'Onsager soit notablement plus faible par rapport aux deux autres effets, pour le Kapton® HN.

Le peu d'études déjà menées sur le Téflon® FEP ne permettent pas de connaître avec exactitude sa dépendance en champ électrique, vis-à-vis de l'interaction électron-matière et du transport de charges. Il est possible que les lois évoquées dans ce chapitre (Onsager et Poole-Frenkel) ne soient pas applicables à ce matériau. Si elles sont applicables, une nouvelle étude paramétrique devrait être effectuée, pour connaître avec précision les paramètres extraits : β , r_0 et φ_0 .

Dans le chapitre 5, le modèle THEMIS est mis en application. Plusieurs matériaux, fréquemment utilisés à bord des satellites, sont étudiés. Il s'agit du Néoflon® FEP, du PolyEtherEtherKetone (PEEK), de l'Epoxy FR4 et du Cirlex®. Les niveaux de potentiels de ces matériaux sont étudiés sous irradiation. L'objectif de ce chapitre sera de déterminer les propriétés électriques de ces matériaux. Pour cela, je synthétise les expériences et les simulations effectuées lors de ce travail de doctorat, afin d'établir une méthodologie d'extraction des paramètres matériau, pour un quelconque polymère sous irradiation. Cette méthodologie est illustrée à la fin du chapitre 5, avec le Kapton® HN. Le comportement en charge de ce dernier est extrapolé, à l'aide du modèle THEMIS, ce qui permet de prédire les risques d'occurrences de décharges électriques.

CHAPITRE 5. Etude de la charge interne et méthodologie d'extraction des propriétés électriques des polymères

Dans le chapitre 2, j'ai décrit les modèles de l'interaction électron-matière et du transport de charges. Sur la base de cet état de l'art, certains modèles ont été choisis pour construire le modèle physique de THEMIS. Ce modèle a été validé dans les chapitres 3 et 4, sur deux polymères, le Téflon® FEP et le Kapton® HN, aux propriétés très différentes. Dans le chapitre 5, THEMIS est mis en application avec deux objectifs principaux. Le premier consiste à montrer que, sur la base de son modèle physique, il est possible d'analyser et de comprendre le comportement en charge de polymères moins connus que le Téflon® FEP et le Kapton® HN. Le deuxième objectif montre que, par une bonne connaissance de l'ordre de grandeur des propriétés électriques d'un matériau (en l'occurrence le Kapton® HN), il est possible d'extrapoler et de prédire son comportement en charge pour un cas d'irradiation non réalisable au sol. Une telle extrapolation permet d'évaluer les risques d'occurrence de décharges électriques.

Ce chapitre se divise en trois parties :

La première partie présente les outils numériques existants dans la communauté du spatial utilisés pour l'étude de la charge interne. Le modèle physique de THEMIS et les hypothèses sur lesquelles il est basé sont comparés pour les différents outils. Les protocoles expérimentaux et les moyens d'irradiation sont ensuite présentés. Plusieurs matériaux sont étudiés : le Néoflon® FEP, le PolyEtherEtherKetone (PEEK), l'Epoxy FR4 et le Cirlex®. Leurs niveaux de potentiels de surface sont mesurés expérimentalement, en utilisant l'enceinte GEODUR, à l'ONERA. Cette enceinte est représentative des courants perçus, en orbite géostationnaire, par les matériaux utilisés dans le cadre de la charge interne. L'objectif premier est d'étudier les propriétés électriques de ces matériaux. Le second objectif est d'analyser qualitativement une éventuelle sensibilité de ces matériaux au champ électrique. Ces quatre polymères ont fait l'objet de recherches moins poussées que le Téflon® FEP ou le Kapton® HN. Pour les caractériser avec plus de précision, il est nécessaire d'effectuer plus d'expériences dédiées et de comparaisons aux résultats du modèle THEMIS. La deuxième partie de ce chapitre propose de répondre cette problématique.

La deuxième partie de ce chapitre a pour objectif de synthétiser les travaux expérimentaux et de modélisation effectués pendant ce travail de doctorat. Cette synthèse permet de construire une méthodologie d'extraction des propriétés électriques généralisable pour tous les polymères. Elle est destinée à comprendre les phénomènes physiques de l'interaction électron-matière, du transport de charges et à améliorer notre compréhension de l'effet du champ électrique sur le comportement des charges.

La dernière partie propose d'illustrer l'utilité d'une telle méthodologie. Elle montre qu'en connaissant les propriétés électriques d'un matériau, il est possible d'extrapoler son comportement en charge. Cette extrapolation est purement numérique et permet de prédire les risques d'occurrence de décharges électriques, pour une configuration d'irradiation donnée, lorsque les expériences ne le permettent pas.

5.1 Etude de la charge interne de quatre polymères

Le comportement en charge du Néoflon® FEP, du PolyEtherEtherKetone (PEEK), de l'Epoxy FR4 et du Cirlex® a été étudié sous une irradiation représentative de l'environnement spatial. Leurs niveaux de potentiels ont été étudiés expérimentalement, à l'aide du banc d'essai GEODUR, et numériquement, à l'aide du modèle THEMIS. Une étude comparative expérience-numérique a été menée pour comprendre les phénomènes physiques qui gouvernent leur comportement en charge sous irradiation. Plus spécifiquement, c'est sur l'effet du champ électrique sur l'interaction électron-matière et le transport de charges que nous nous sommes focalisés. Cet effet a été analysé en détails, quantitativement, sur le Kapton® HN, mais qualitativement pour ces quatre matériaux. Le premier objectif de cette partie est de comprendre si l'effet du champ électrique existe sur d'autres polymères, autres que le Kapton® HN. Si un tel effet existe, le deuxième objectif est d'analyser si l'interaction électron-matière et le transport de charges suivent, pour ces quatre matériaux, les mêmes lois que pour le Kapton® HN. Il s'agit de l'effet d'Onsager pour l'interaction électron-matière et des effets Poole-Frenkel et tunnel pour le transport de charges. Les détails de cette étude applicative sont décrits dans l'article [81] en annexe (soumis et en cours de révision dans *Journal of Applied Physics*, intitulé « *Study of internal charging of four commonly used polymers through experimental and numerical analysis* »). Dans la partie 5.2, je résume les conclusions de cette étude ainsi que les raisons qui m'ont conduit à utiliser THEMIS plutôt que d'autres codes de charge interne existants.

5.1.1 Outils numériques existants pour l'étude de la charge interne

Dans la communauté du spatial, de nombreux outils numériques sont utilisés pour l'étude de la charge interne. Ils sont basés sur des modèles physiques différents, présentés dans le chapitre 2. Seuls les plus utilisés sont présentés, et leurs caractéristiques principales reportées dans le Tableau 1. Il existe THEMIS, MCICT [2], NUMIT [3], DICTAT [4] et SPIS-IC [22], [82]. THEMIS et SPIS-IC (Spacecraft Plasma Interaction Software – Internal Charging) sont développés par l'ONERA. MCICT (Monte-Carlo Internal Charging Tool) a été développé dans le cadre du projet JUICE [2], entrepris par l'ESA. NUMIT (NUMerical InTegration) a été développé par la NASA. DICTAT (DERA Internal Charging Threat Assessment Tool) a été développé par la société QinetiQ (DERA est l'ancien nom de QinetiQ).

Dans le tableau ci-dessous, les modèles de l'électrostatique, de l'interaction électron-matière et du transport de charges présentés dans le chapitre 2 sont comparés pour chaque outil numérique. Les modèles physiques sur lesquels THEMIS est basé sont fondamentalement différents de ceux de MCICT, NUMIT et DICTAT. Son modèle de l'électrostatique et du transport de charges est très proche de celui de SPIS-IC.

Tableau 1 : Récapitulatif des outils numériques principaux utilisés dans la communauté du spatial, destinés à l'étude de la charge interne.

		THEMIS	MCICT	NUMIT	DICTAT	SPIS-IC
Modèle de l'électrostatique : système Poisson-Ohm	Equation de Poisson (Chapitre 2, partie 2.1)	X		X		X
	Equation de Poisson simplifiée : Approximation RC (Chapitre 2, partie 2. 1)		X		X	
Modèle de l'interaction électron-matière	Approche probabiliste Méthode Monte-Carlo (Chapitre 2, partie 2.2.1)		X	X		X
	Approche analytique semi-empirique (Chapitre 2, partie 2.2.2)	X			X	
Modèle du transport de charges	Modèle de Fowler (Chapitre 2, partie 2.3.1.1)		X	X	X	
	Modèle d'hopping (Chapitre 2, partie 2.3.1.2)		X	X	X	
	Modèle de Génération-Recombinaison (Chapitre 2, partie 2.3.1.3)	X				X
Dimensionnalité		1D	1D	3D	1D	3D

5.1.1.1 THEMIS face à MCICT, NUMIT et DICTAT

THEMIS a été développé pour pallier à l'insuffisance des modèles physiques des outils numériques MCICT, NUMIT et DICTAT. Ces 3 outils utilisent un modèle de l'électrostatique et de conductivité trop simplifié, qui ne peut pas expliquer les phénomènes physiques qui

régissent l'interaction électron-matière et le transport de charges, dans les polymères sous irradiation. Ces outils ne rendent pas compte des effets de spectres distribués en énergie et de l'historique radiatif du matériau. Pour décrire les évolutions temporelles de potentiel de surface, MCICT et DICTAT modélisent le matériau comme un circuit de Résistance-Capacité (chapitre 2, partie 2.1). Cette approximation est correcte si le matériau est irradié proche de la surface, par un faisceau mono-énergétique. En environnement spatial, ce n'est pas le cas. Les matériaux sont irradiés en volume, par un faisceau d'électrons avec un spectre en énergies. MCICT, NUMIT et DICTAT utilisent le modèle de Fowler et d'hopping pour décrire les évolutions temporelles de la conductivité. C'est un modèle basique, qui suppose que le courant induit par irradiation a atteint un état d'équilibre. Cette approximation requiert que le taux de génération des paires électron-trou soit en équilibre avec le taux de recombinaison entre les électrons et les trous. Cette hypothèse n'est pas vérifiée, puisque le courant mesuré lors des expériences au sol montre des variations temporelles en fonction du temps d'irradiation. L'équilibre n'est pas atteint. De plus, les paramètres du modèle de Fowler, tels que k_p et Δ , ne sont représentatifs d'aucun phénomène physique, contrairement au modèle THEMIS, qui décrit le temps de piégeage/dépiégeage des charges, leurs mobilités, les phénomènes de conduction et de recombinaison. Des outils numériques tels que MCICT, NUMIT et DICTAT ne sont donc pas représentatifs de la physique du transport de charges et ne peuvent pas décrire l'ensemble des phénomènes observés en vol. Ils ne peuvent pas être utilisés pour extrapoler le comportement en charge des polymères dans des configurations d'irradiation complexes : spectres multi-énergétiques et variations temporelles de ces derniers.

5.1.1.2 THEMIS face à SPIS-IC

SPIS-IC utilise un modèle physique très proche de celui de THEMIS. Il utilise les mêmes équations, mais ne prend pas en compte la conduction des charges et l'implantation. La conduction des charges est calculée à l'aide de la loi d'Ohm, et concerne la charge nette, c'est-à-dire la conduction des électrons plus les trous. SPIS-IC ne distingue pas la conduction des électrons et des trous. Par conséquent, son système d'équations du calcul des densités de charges change de celui de THEMIS, de la manière suivante :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = g(x, t, T, E) - \alpha_1 n p_t - \alpha_2 n p - \frac{n}{\tau_n} + \frac{n_t}{\tau_{n_t}} \quad (5.1.2.2.1)$$

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = \frac{n}{\tau_n} - \frac{n_t}{\tau_{n_t}} - \alpha_3 n_t p \quad (5.1.2.2.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g(x, t, T, E) - \alpha_3 n_t p - \alpha_2 n p - \frac{p}{\tau_p} + \frac{p_t}{\tau_{p_t}} \quad (5.1.2.2.3)$$

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = \frac{p}{\tau_p} - \frac{p_t}{\tau_{p_t}} - \alpha_1 n p_t \quad (5.1.2.2.4)$$

D'un point de vue physique, THEMIS a quelques avantages que SPIS-IC n'a pas. Il prend en compte localement les courants de conduction des électrons et des trous et considère l'effet du champ électrique sur leur mobilité et leur temps de dé-piégeage (chapitre 4). THEMIS et SPIS-IC diffèrent sur le calcul du dépôt de dose et de la génération de paires électron-trou. THEMIS utilise des équations déterministes analytiques, tandis que SPIS-IC utilise des simulations Monte-Carlo. L'approche Monte-Carlo est plus précise, mais plus couteuse en temps de calcul.

D'un point de vue numérique, la grande différence entre ces deux modèles réside dans le schéma de calcul de l'équation de Poisson et des densités de charges. SPIS-IC utilise un schéma implicite et THEMIS utilise un schéma explicite. Le schéma explicite génère des temps de calcul qui sont relativement longs, liés au respect des conditions CFL (chapitre 3, partie 3.1.3), qui nécessitent d'avoir un pas temporel très petit. Si les conditions CFL ne sont pas respectées, le schéma diverge. Ce schéma est limité lorsque les charges ont des mobilités très importantes. L'avantage du schéma implicite est qu'il s'abstient des conditions CFL, ce qui est possible car il néglige la divergence des courants de conduction ∇J . Cette hypothèse est légitime si le faisceau d'électrons incidents n'est pas un faisceau mono-énergétique, mais un spectre distribué en énergies. Un faisceau mono-énergétique génère d'importantes inhomogénéités de densités de charges dans le matériau, qui rendent alors ∇J non négligeable. A titre d'exemple, SPIS-IC ne pourrait pas reproduire l'expérience en irradiations successives avec des faisceaux mono-énergétiques présentée dans le chapitre 3, pour le Téflon® FEP. En s'abstenant des conditions CFL, le schéma implicite permet de travailler avec de grands pas temporels, ce qui conduit à des temps de calcul moins couteux que le schéma explicite mais introduit des erreurs de calcul. Contrairement au schéma explicite, le schéma implicite est plus difficile à mettre en œuvre.

Ces deux outils numériques sont complémentaires. THEMIS est utilisé pour comprendre les effets physiques qui régissent l'interaction électron-matière et le transport de charges. Il permet, sur la base d'une méthodologie d'extraction des paramètres (présentée dans la partie 5.2), de caractériser les matériaux. Cela permet de comprendre leur comportement en charge sous une irradiation représentative de l'environnement spatial. SPIS-IC utilise les paramètres matériaux obtenus par THEMIS pour valider son schéma numérique. Cette validation s'effectue en comparant, pour un cas d'irradiation identique, les résultats de simulation obtenus par THEMIS et SPIS-IC. Cela permet d'extrapoler des résultats 1D (THEMIS) en 3D (SPIS-IC).

5.1.2 Etude expérimentale, comparaisons avec les résultats du modèle THEMIS

Les moyens expérimentaux et les protocoles d'irradiations dans GEODUR sont détaillés en annexe. Pour irradier les échantillons, deux courants différents ont été utilisés: 1 pA/cm² et 10 pA/cm². Il existe un facteur d'accélération de dix entre ces deux courants. Il permet de générer rapidement de forts niveaux de potentiels, et d'étudier l'influence d'éventuels effets non linéaires du champ électrique, sur le comportement des charges.

La Figure 5.84 représente les potentiels de surface expérimentaux (lignes pointillées) et numériques (lignes continues), en fonction du temps, pour les quatre polymères, pour le courant 1 pA/cm². Pour ce courant, les résultats expérimentaux de mesure de potentiel de surface de la plupart des polymères présentent des évolutions temporelles linéaires, en phase d'irradiation et de relaxation. Sous un tel courant, malgré quelques écarts, le modèle THEMIS a été capable de représenter assez bien les cinétiques du comportement en charge de chaque polymère.

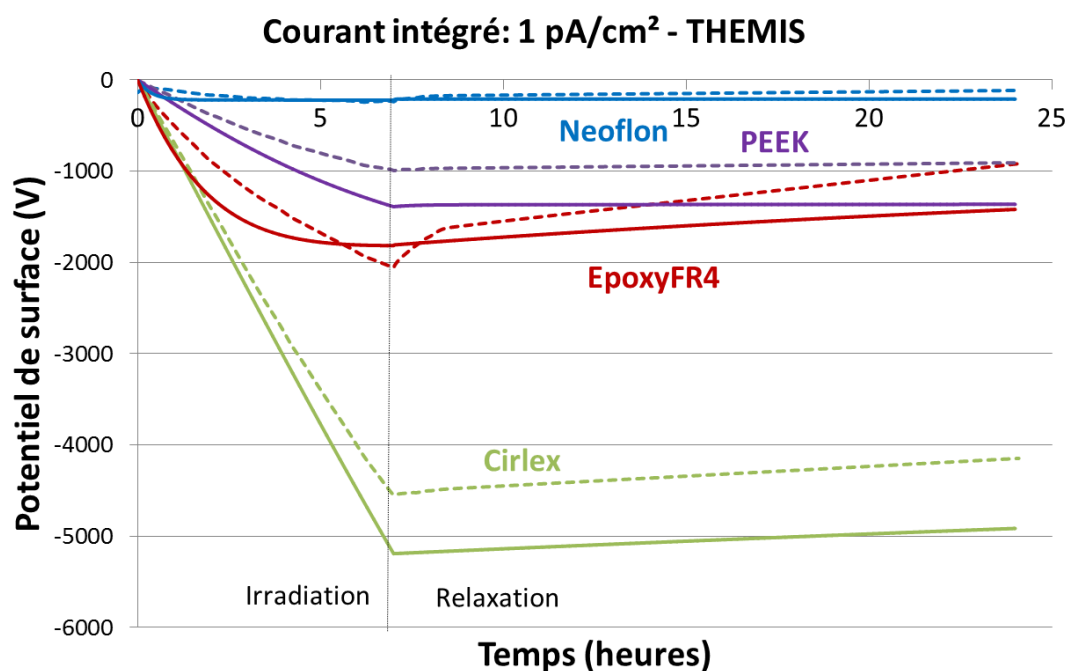


Figure 5.84 : Potentiel de surface expérimental (lignes pointillées) et numérique (lignes continues) en fonction du temps, pour chaque polymère, obtenu avec l'enceinte GEODUR et le modèle THEMIS, avec un courant de 1 pA/cm².

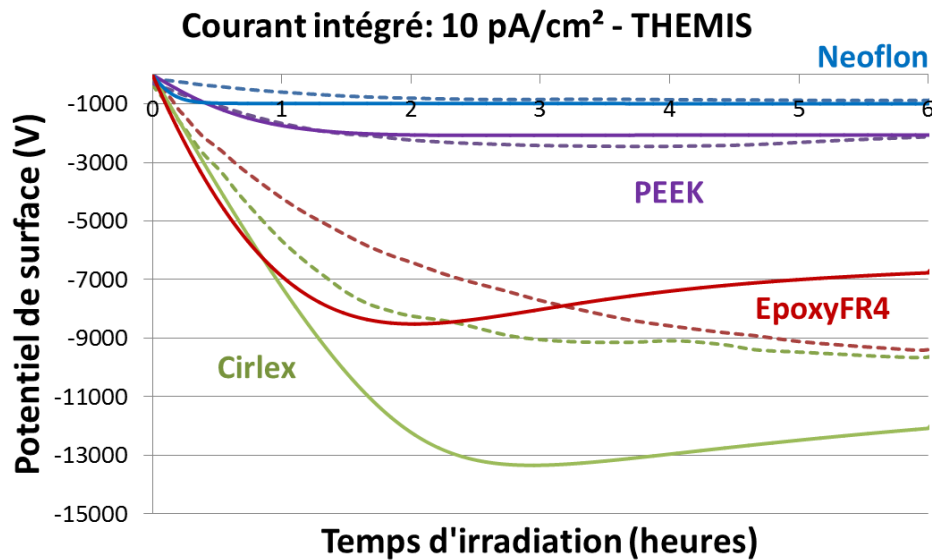


Figure 5.85 : Potentiel de surface expérimental (lignes pointillées) et numérique (lignes continues) en fonction du temps, pour chaque polymère, obtenu avec l'enceinte GEODUR et le modèle THEMIS, avec un courant de 10 pA/cm².

La Figure 5.85 représente les potentiels de surface expérimentaux (lignes pointillées) et numériques (lignes continues), en fonction du temps, pour les quatre polymères, pour le courant 10 pA/cm². Ce courant n'a pas présenté les mêmes résultats. Les résultats expérimentaux ont montré des évolutions temporelles du potentiel de surface des polymères non linéaires. Ces évolutions suggèrent qu'il existe, de la part du champ électrique, un effet non linéaire sur l'interaction électron-matière et/ou le transport de charges. Nous supposons que ces effets sont identiques à ceux démontrés sur le Kapton® HN, comme je l'ai présenté dans le chapitre 4. Le modèle THEMIS n'a pas su reproduire avec suffisamment de précision ces évolutions. Les raisons des divergences observées entre résultats expérimentaux et numériques sont expliquées ci-dessous.

5.1.3 Origines des différences entre résultats expérimentaux et numériques

Les divergences observées entre les résultats expérimentaux et les résultats du modèle THEMIS ont différentes explications possibles. Ces explications sont décrites en fonction de leur importance, par ordre décroissant :

- 1) Premièrement, comme je l'ai expliqué dans le chapitre 3, les valeurs des paramètres du modèle de chaque matériau (qui correspondent aux propriétés électriques attribuées aux matériaux), sont certainement assez éloignées des valeurs réalistes. Il peut s'agir du temps caractéristique de piégeage, de dé-piégeage, de la mobilité effective des charges, des coefficients de recombinaison, etc. Ces paramètres ont fait l'objet de recherches détaillées dans le cas du Kapton® HN. Les quatre polymères présentés dans ce chapitre n'ont pas fait l'objet de

recherches aussi poussées, ce qui peut expliquer les divergences entre résultats numériques et expérimentaux.

2) Deuxièmement, il est probable que ces matériaux aient des sensibilités différentes à l'effet du champ électrique. Dans le chapitre 4, j'ai montré que le champ électrique influe sur la génération de paires électron-trou, via l'effet d'Onsager, sur la mobilité effective des charges, via l'effet Poole-Frenkel et tunnel, et sur le temps de dé-piégeage des trous, via l'effet Poole-Frenkel, pour le Kapton® HN. Dans cette partie, j'ai supposé que les quatre polymères étudiés suivent les mêmes lois que le Kapton® HN, vis-à-vis du champ électrique. Il y a deux possibilités : d'un côté, ces polymères ne dépendent pas du champ électrique avec les mêmes lois, ce qui expliquerait de telles différences entre résultats expérimentaux et numériques. De l'autre côté, il est possible qu'ils suivent bien ces lois, mais que les paramètres qui les déterminent soient différents d'un matériau à l'autre. Il s'agit du rayon de thermalisation r_0 , du rendement de production de paires d'ions thermalisés par électron absorbé φ_0 , de la constante de Poole-Frenkel β_{PF} et de la constante β relative aux effets combinés Poole-Frenkel et tunnel. L'extraction de ces paramètres a nécessité, pour le Kapton® HN, des expériences dédiées, dont les résultats ont été étudiés en détails et comparés à ceux du modèle THEMIS. De telles études n'ont pas été réalisées sur ces quatre polymères, ce qui ne permet pas de donner l'origine exacte des écarts expérience-numérique.

3) Troisièmement, au sol, dans les expériences, il existe de nombreux électrons rétrodiffusés par la feuille de diffusion et le porte échantillon. Ces électrons ont un angle d'incidence variable. Ils impactent le matériau de côté et ne sont pas pris en compte dans le modèle THEMIS. Des études menées à l'ONERA ont montré que ces phénomènes peuvent avoir une influence notable sur les niveaux de charges des polymères.

4) Quatrièmement, l'émission électronique secondaire et la déflexion des électrons incidents, dont le potentiel est inférieur au potentiel de surface créé par les électrons implantés, ne sont pas prises en compte dans le modèle THEMIS. Ces effets peuvent avoir un impact sur les niveaux de potentiels de surface, en diminuant leurs valeurs. En les intégrant au modèle, il serait possible d'abaisser les niveaux de potentiels, et d'améliorer légèrement l'accord entre les résultats expérimentaux et numériques.

Les quatre points évoqués montrent qu'il est difficile d'attribuer avec précision les origines des différences observées, entre résultats expérimentaux et numériques. Les points 1 et 2 mettent en évidence les limitations liées à la méconnaissance des effets du champ électrique sur leur comportement en charge et plus généralement, de la méconnaissance des propriétés matériaux.

Pour les déterminer avec précision, il est nécessaire de mener des études plus approfondies sur les évolutions temporelles des leurs niveaux de potentiels, de conductivités et de densités de charges, sous irradiation. Pour cela, je propose de décrire, dans la partie 5.2, une méthodologie généralisant l'extraction des paramètres matériau, pour un quelconque polymère. Je synthétise les travaux de comparaisons expérience-numérique, réalisés dans les chapitres 3 et 4, pour établir une telle méthodologie.

5.2 Méthodologie pour la caractérisation des propriétés électriques des polymères dans le cadre de la charge interne

L'objectif de cette partie est d'établir une méthodologie, sur la base des travaux effectués lors de ce travail de doctorat, pour caractériser les propriétés électriques d'un polymère quelconque, dans le cadre de l'étude de la charge sur satellite et de la prédiction d'occurrence de décharges électriques. Caractériser les propriétés électriques d'un polymère permet de comprendre son comportement sous irradiation et, en utilisant un outil numérique tel que THEMIS, de l'extrapoler pour d'autres environnements radiatifs. Cette caractérisation revient à extraire, dans la mesure du possible et avec le plus de précision, l'ensemble de ses paramètres : τ_n , τ_p , τ_{n_t} , τ_{p_t} , μ_n , μ_p , D_n , D_p , α_1 , α_2 , α_3 , β , β_{PF} , r_0 et φ_0 (décrits dans le Tableau 2).

Pour extraire avec une bonne précision les paramètres du modèle THEMIS, il est nécessaire d'effectuer des expériences complémentaires dans le but de mesurer différentes grandeurs physiques telles que le potentiel de surface, le courant et la densité totale de charges. Une quantité suffisante et un choix judicieux de mesures et protocoles expérimentaux, réduisent les incertitudes sur les ordres de grandeur des paramètres matériau. Pour extraire un paramètre donné, il faut l'étudier dans une gamme de temps où son influence est la plus grande et l'influence des autres paramètres peu significative. Cela signifie que la durée d'irradiation et/ou de relaxation correspond à l'ordre de grandeur d'action (ou temps caractéristique) de ce paramètre, ce qui permet d'écarter l'influence d'autres paramètres et de conserver ceux qui nous intéressent.

Dans la suite de cette partie, les différentes étapes nécessaires à l'extraction de chacun de ces paramètres sont décrites. Elles sont résumées dans le Tableau 2. Chaque étape permet de déterminer ou confirmer plusieurs paramètres. Au sein de ces étapes, je décris le protocole expérimental et la méthode d'extraction des paramètres associés à l'étape. Cette extraction est illustrée avec des exemples, dans le cas du Kapton® HN. Les exemples ne sont pas illustrés sur tous les paramètres, seuls certains d'entre eux sont décrits. D'une étape à l'autre, les degrés de liberté du modèle THEMIS sont réduits, ce qui facilite l'extraction des paramètres suivants.

Tableau 2 : Tableau récapitulatif des étapes d'extraction des propriétés électriques des polymères dans le cadre de la charge interne, en utilisant les expériences et le modèle THEMIS

	1 ^{ère} étape : irradiation basse énergie mono-énergétique	2 ^{ème} étape : irradiation haute énergie mono-énergétique	3 ^{ème} étape : irradiation haute énergie mono-énergétique	4 ^{ème} étape : irradiation basse et haute énergie	5 ^{ème} étape : irradiations successives en mono-énergétique	6 ^{ème} étape : nouvelle itération de chaque étape
Mesure expérimentale	Potentiel de surface (sonde Kelvin)	Courant de sortie (picoampèremètre)	Courant de sortie (picoampèremètre)	Potentiel de surface (sonde Kelvin)	Densité totale de charges (méthode PEA)	
τ_n : Temps caractéristique de piégeage des électrons	X		X		X	X
τ_p : Temps caractéristique de piégeage des trous		X		X	X	X
τ_{n_t} : Temps caractéristique de dé-piégeage des électrons	X				X	X
τ_{p_t} : Temps caractéristique de dé-piégeage des trous				X	X	X
μ_n, μ_p : Mobilités effectives des électrons et des trous		X			X	X
$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$: Coefficients de recombinaison				X		X
β : Coefficient associé à l'effet du champ électrique sur la mobilité effective des charges		X				X
β_{PF} : Coefficient de Poole-Frenkel				X		X
r_0 : Rayon de thermalisation		X				X
φ_0 : Rendement de production de paires d'ions thermalisés par électron absorbé			X			X

L'étape 1 permet de déterminer τ_n et τ_{n_t} . Irradiation : faisceau de basse énergie qui s'implante en surface. Le potentiel de surface est mesuré.

L'étape 2 permet de confirmer τ_n et de déterminer β . Irradiation : faisceau de haute énergie, complètement traversant, avec un fort flux et des temps courts. Le courant de sortie est mesuré.

L'étape 3 permet de déterminer τ_p , μ_n , μ_p , β et r_0 . Irradiation : faisceau de haute énergie, complètement traversant, avec un faible flux et des temps courts. Le courant de sortie est mesuré.

L'étape 4 permet de confirmer τ_p et de déterminer τ_{p_t} , α_1 , α_2 , α_3 et β_{PF} . Irradiation : faisceau basse énergie (chargeant) et faisceau haute énergie (ionisant). Le potentiel de surface est mesuré.

L'étape 5 permet de confirmer τ_n , τ_p , τ_{n_t} , τ_{p_t} , μ_n et μ_p . Irradiation : faisceaux mono-énergétiques successifs. La densité totale de charges est mesurée.

L'étape 6 permet de confirmer tous les paramètres en itérant une nouvelle fois chaque étape.

5.2.1 1^{ère} étape : extraction de τ_n et τ_{n_t} – Mesure du potentiel de surface et irradiation basse énergie

Parmi l'ensemble des paramètres, τ_n et τ_{n_t} sont les paramètres les plus faciles à extraire, avec l'incertitude la plus faible, comme il a déjà été précisé dans les chapitres 3 et 4. Pour cette raison, il est préférable de commencer par leur extraction. La configuration expérimentale et la méthode d'extraction nécessaires pour les déterminer sont les suivantes :

- Configuration expérimentale

- Faisceau mono-énergétique de basse énergie : 20 keV.

- Matériau avec une épaisseur d'environ 100 μm , voire plus, de telle sorte qu'il n'y ait aucun électron qui traverse l'échantillon, et que leur implantation reste proche de la surface, à quelques micromètres. Cette épaisseur sera conservée pour les étapes suivantes, afin de s'assurer que les propriétés électriques du matériau étudié restent les mêmes.

- Mesure du potentiel de surface, au niveau de la face irradiée.

- Durée d'irradiation : Au minimum, environ de l'ordre de grandeur de la valeur de τ_n supposée.

- Durée de relaxation : Au minimum, environ de l'ordre de grandeur de la valeur de τ_{n_t} supposée.

- Température ambiante.

Cette configuration permet de s'affranchir de la RIC, donc des termes de conduction, en n'ionisant pas le volume du matériau. Les électrons et les trous générés en surface par ionisation sont en équilibre. Dans une telle configuration, il est raisonnable de supposer que l'évolution du potentiel de surface dépend principalement du flux d'électrons incidents et de leurs temps caractéristiques de piégeage et de dé-piégeage.

- Méthode d'extraction

a) Lors de la phase d'irradiation, l'étude de l'évolution du potentiel de surface permet d'obtenir un très bon ordre de grandeur de τ_n . Si l'évolution est linéaire, cela signifie que les électrons restent piégés en surface. Si l'évolution présente un fléchissement, cela signifie que les électrons sont susceptibles de se piéger lentement ou de se dé-piéger, et, sous l'effet du champ électrique, de se déplacer dans le volume du matériau. Dans ce cas, le barycentre du plan de charges se rapproche de la masse du matériau et le potentiel augmente moins rapidement.

b) Lors de la phase de relaxation, à l'arrêt de l'irradiation, l'étude de l'évolution du potentiel de surface permet de confirmer l'ordre de grandeur de τ_n et d'estimer avec un bon ordre de grandeur τ_{nt} . Si, à l'arrêt de l'irradiation le potentiel reste constant et n'évolue pas (cas du Téflon® FEP), cela signifie que les électrons sont piégés rapidement (τ_n petit) et de manière permanente (τ_{nt} grand). Si le potentiel ne reste pas constant, ses variations temporelles indiquent les ordres de grandeur de ces paramètres.

Usuellement, les électrons sont des charges stables dans les polymères étudiés. On s'attend donc à obtenir des valeurs du temps de piégeage très petites et des valeurs du temps de dé-piégeage très grandes (quasi-infinies sur l'échelle de temps de la vie du satellite). Comme je le présente dans l'étape 2, il est possible de réaliser une configuration expérimentale différente, avec des mesures de courant, pour confirmer l'ordre de grandeur de τ_n et déterminer φ_0 .

- Exemple avec le temps de piégeage : cas du Kapton® HN

La Figure 5.86 représente le potentiel de surface numérique du Kapton® HN, en fonction du temps d'irradiation, obtenu par le modèle THEMIS. Elle illustre l'influence du temps de piégeage des électrons sur la cinétique de potentiel. Le cas de référence est représenté par la courbe noire pointillée avec un temps de piégeage de 0.2 secondes. Quand le temps de piégeage augmente, un fléchissement apparaît sur la cinétique du potentiel de surface, qui traduit un déplacement des électrons en direction du volume.

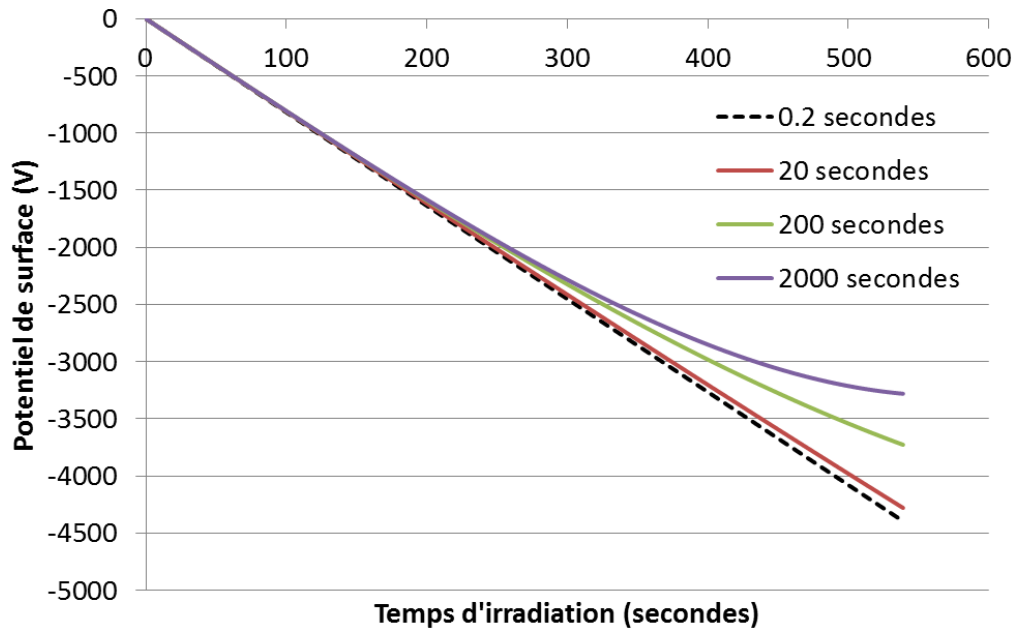


Figure 5.86 : Influence du temps de piégeage des électrons sur le potentiel de surface.

5.2.2 2^{ème} étape : extraction de μ_n , μ_p , β , r_0 et τ_p – Mesure de courant et irradiation haute énergie/faible flux/temps courts

○ Configuration expérimentale

Ces 4 paramètres sont extraits avec une configuration expérimentale quasi-identique à celle de l'étape 2. Il y a deux différences :

-La valeur du flux est beaucoup plus faible dans cette expérience.

-Plusieurs champs électriques différents sont appliqués sur l'échantillon. Pour chaque champ électrique, le courant de sortie est mesuré. Cela permet d'étudier l'influence du champ électrique, sur l'interaction électron-matière et le transport de charges.

○ Méthode d'extraction

Extraction de μ_n , μ_p , D_n , D_p , β et r_0 : Cette configuration permet de simplifier le système d'équations différentielles non linéaire d'ordre 1, sur lequel le modèle THEMIS est basé. Ces simplifications ont été vues dans le chapitre 4, et ont permis d'obtenir une expression analytique simple de la conductivité, en fonction de la mobilité des charges, de β et de r_0 . Les paramètres μ_n , μ_p , β et r_0 sont déterminés en analysant les variations de la conductivité avec le champ électrique. β est d'abord obtenu en phase de relaxation, car l'effet d'Onsager n'est pas présent. La phase d'irradiation permet de confirmer β et de déterminer les valeurs de mobilité et de r_0 . Ces valeurs sont ajustées en faisant correspondre les données expérimentales de conductivité et

la conductivité numérique calculée par le modèle THEMIS. D_n et D_p sont déterminés par connaissance des mobilités, en utilisant la loi de Nernst-Einstein.

Extraction de τ_p dans le cas où τ_p est relativement petit, de l'ordre de quelques secondes (cas du Kapton® HN). τ_p est obtenu en analysant les profils de conductivité en fonction du temps d'irradiation et des différents champs électriques appliqués. La conductivité est analysée pendant la phase *d'augmentation lente*. La pente de cette courbe dépend fortement de τ_p . En utilisant le modèle THEMIS, τ_p est ajusté pour obtenir un bon accord entre les résultats expérimentaux et numériques. Le cas où τ_p est relativement grand est étudié à la 4^{ème} étape.

○ Exemple sur le temps de piégeage et la mobilité des trous : cas du Kapton® HN

La Figure 5.87 et la Figure 5.88 représentent la conductivité du Kapton® HN, en fonction du temps d'irradiation, obtenue par le modèle THEMIS. Dans les deux figures, le cas de référence, qui est représentatif des niveaux de conductivité expérimentaux, est représenté par la courbe noire pointillées. La Figure 5.87 illustre l'influence du temps de piégeage des trous sur la conductivité. Quand il augmente, la conductivité augmente. Le même comportement est observé sur la Figure 5.88, qui illustre l'influence de la mobilité des trous sur la conductivité. Pour obtenir le meilleur accord entre les résultats expérimentaux et numériques, le jeu de paramètre est ajusté.

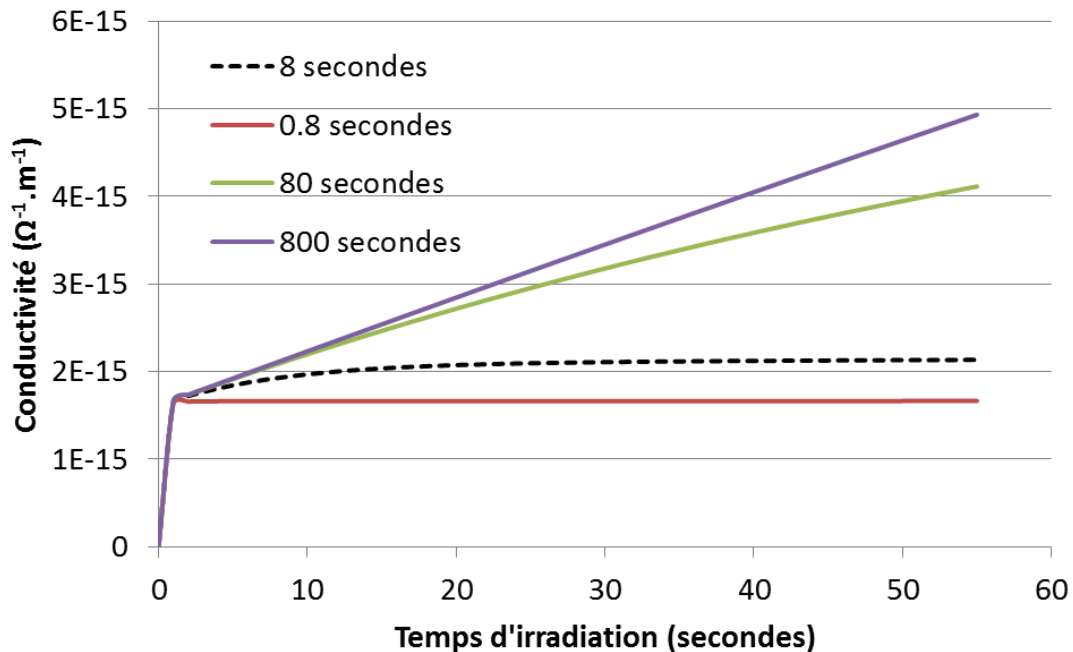


Figure 5.87 : Influence du temps de piégeage des trous sur les niveaux de conductivité.

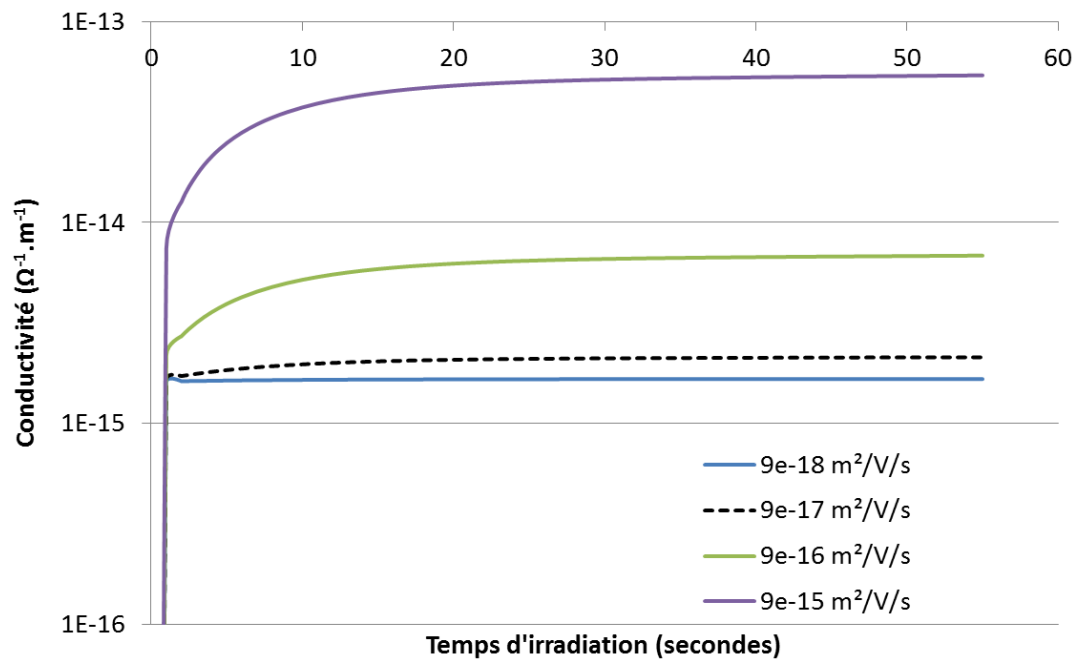


Figure 5.88 : Influence de la mobilité des trous sur les niveaux de conductivité.

5.2.3 3^{ème} étape : extraction de φ_0 et confirmation de τ_n – Mesure de courant et irradiation haute énergie/fort flux/temps courts

Ces 2 paramètres sont extraits avec une configuration expérimentale différente de la précédente :

- Configuration expérimentale

- Faisceau mono-énergétique de haute énergie avec un fort flux : 400 keV.
- Matériau identique à la première étape, pour être sûr de conserver les mêmes propriétés.
- Le matériau est métallisé sur ses deux faces, et un champ électrique macroscopique, constant dans le temps, est appliqué. Le temps d'irradiation est court, de quelques dizaines de secondes, pour limiter l'influence de certains effets : dé-piégeage des charges, termes de transport des charges et effets de recombinaison.
- Mesure du courant en face arrière.
- Température ambiante.

Cette configuration permet de s'affranchir de presque tous les termes du système d'équations qui représente la variation temporelle des densités de charges de THEMIS (chapitre 4, partie 4.1.2.4).

- Méthode d'extraction

Un minorant de φ_0 est déterminé. Pour l'obtenir, il est préférable que le flux d'électrons incidents soit important. Cela permet d'obtenir un courant mesuré grand, moins soumis aux erreurs de mesure des instruments, et donc de diminuer l'incertitude sur le calcul du minorant de φ_0 .

a) Phase d'irradiation : Pour obtenir un minorant, on utilise 2 densités de courants différentes : J_{exp} et J_{SP} . Rappelons que J_{exp} est la densité de courant mesurée et J_{SP} est la densité de courant volumique Sans Piégeage. J_{SP} suppose que le piégeage des charges n'a pas lieu. Donc $J_{SP} > J_{exp}$. Puisque J_{SP} dépend de φ_0 , cela permet de déterminer un minorant de φ_0 (chapitre 4, partie 4.2.1.2).

b) Phase de relaxation : Il est possible de confirmer la valeur de τ_n dès l'arrêt de l'irradiation, si l'échantillonnage temporel des mesures de courant est suffisamment précis. Lorsque l'irradiation est arrêtée, le courant mesuré chute brutalement. Cette cinétique donne un très bon ordre de grandeur sur la valeur de τ_n . Pour le Kapton® HN, un échantillonnage de 0,1 seconde a permis de constater une diminution quasi-instantanée du courant à l'arrêt de l'irradiation. En moins d'une seconde, le courant a diminué, ce qui permet d'établir l'ordre de grandeur de ce coefficient au dixième de seconde, ou au moins majoré à une seconde.

5.2.4 4^{ème} étape : extraction de τ_p , τ_{pt} , β_{PF} , α_1 , α_2 et α_3 – Mesure du potentiel de surface et irradiation avec faisceau de basse et haute énergie

○ Configuration expérimentale

Ces 4 paramètres sont extraits avec une configuration expérimentale très différente de la précédente, mais quasi-identique à celle de la 1^{ère} étape. Il y a quelques différences par rapport à la 1^{ère} étape :

-L'irradiation est réalisée avec 2 faisceaux mono-énergétiques superposés : 20 keV et 400 keV. Le faisceau 20 keV permet de charger l'échantillon et le faisceau 400 keV de l'ioniser, donc d'induire de la RIC, pour être représentatif des conditions d'irradiations spatiales.

-Durée d'irradiation : Au minimum, environ de l'ordre de grandeur de la valeur de τ_p supposée.

-Durée de relaxation : Au minimum, environ de l'ordre de grandeur de la valeur de τ_{pt} supposée.

-Mesure du potentiel de surface, au niveau de la face irradiée et du courant en face arrière.

○ Méthode d'extraction

Extraction de τ_p (phase d'irradiation) dans le cas où τ_p est relativement grand, de l'ordre de quelques milliers de secondes (cas du Téflon® FEP). Il est alors nécessaire d'effectuer une

irradiation longue, qui dépasse l'ordre de grandeur estimé de τ_p . Le potentiel de surface et le courant sont mesurés. Pour le Téflon® FEP, nous avons remarqué que le potentiel de surface décroît à partir de 6000 secondes après le début de l'irradiation, entre la phase 2 et la phase 3 (chapitre 3, partie 3.2.2.2.2). Cette décroissance, qui s'observe également sur les profils de conductivité, est caractéristique de l'ordre de grandeur de τ_p .

Extraction de α_1 , α_2 et α_3 (phase d'irradiation) : le phénomène de recombinaison est important quand les densités des charges sont importantes. En effet, la probabilité qu'un électron rencontre un trou augmente quand leurs densités augmentent. Pour cette raison, il est pertinent d'étudier l'influence des facteurs de recombinaison pour des temps d'irradiations relativement longs. La valeur des coefficients α_1 , α_2 et α_3 influe sur la pente de l'évolution temporelle du potentiel de surface, surtout notable lorsque l'irradiation est prolongée. Par exemple, pour le Téflon® FEP, il convient d'étudier la phase 3 d'irradiation, lorsque le potentiel de surface augmente de nouveau (chapitre 3, partie 3.2.2.2.3). La pente du potentiel de surface en phase 3 dépend de α_1 , α_2 et α_3 . En faisant correspondre les pentes obtenues numériquement (THEMIS) et expérimentalement, il est possible d'obtenir un ordre de grandeur sur la valeur de ces coefficients. En revanche, il est difficile de savoir si les coefficients diffèrent significativement. Pour cette raison, nous supposons que leur poids est identique.

Extraction de τ_{pt} et β_{PF} (phases d'irradiation et de relaxation) : τ_{pt} et β_{PF} sont déterminés par la phase d'irradiation et de relaxation. Ces deux paramètres sont réglés pour obtenir un bon accord entre l'évolution temporelle des niveaux de potentiel numériques (THEMIS) et expérimentaux.

○ Exemple avec le paramètre β_{PF} : Kapton® HN

La Figure 5.89 représente le potentiel de surface numérique du Kapton® HN, en fonction du temps d'irradiation, obtenu à l'aide du modèle THEMIS. La courbe noire est le cas de référence, représentatif des résultats expérimentaux. Cette figure illustre l'influence de β_{PF} sur les niveaux de potentiels. Quand il augmente, le dé-piégeage des trous augmente et les niveaux de potentiels diminuent.

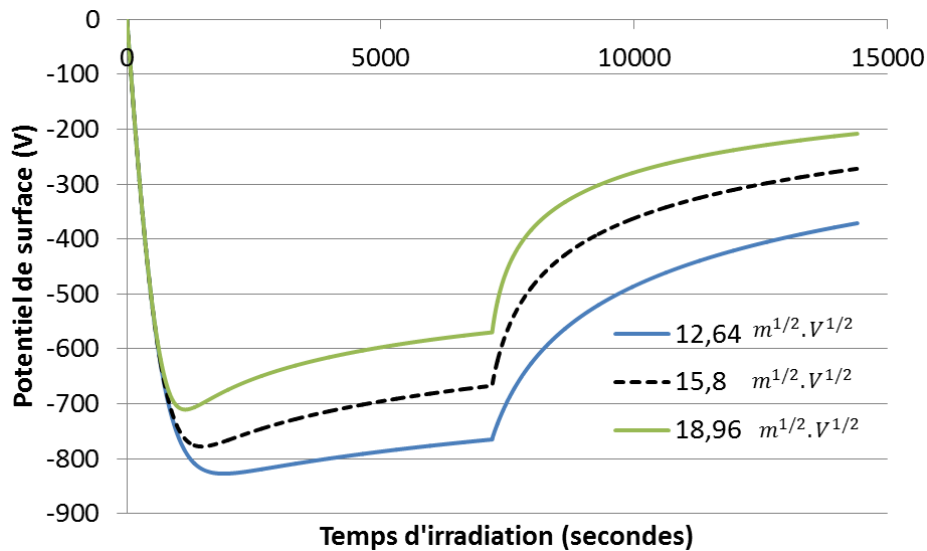


Figure 5.89 : Influence de β_{FF} sur les niveaux du potentiel de surface.

5.2.5 5^{ème} étape : confirmation de τ_n , τ_p , τ_{n_t} , τ_{p_t} , μ_n , μ_p – Mesure de la densité totale de charges et irradiations successives en faisceaux mono-énergétiques

Pour confirmer les valeurs de ces 6 paramètres, une dernière expérience est faite. Contrairement aux expériences précédentes où le potentiel de surface (sonde Kelvin) et le courant (pico-ampèremètre) étaient mesurés, nous mesurons dans cette expérience la densité totale de charges (méthode PEA). L'expérience de la 5^{ème} étape est la suivante :

- Configuration expérimentale

- Faisceaux mono-énergétiques différents, successifs, intercalés par des temps de relaxation : 20 keV, 125 keV, 145 keV et 165 keV.
- Matériau épais, 250 μm , pour étudier le déplacement du barycentre du plan de charges.
- Mesure de la densité totale de charges.

- Méthode d'extraction

Comme je l'ai montré dans le chapitre 3 (partie 3.2.2.1.2), le déplacement du barycentre du plan de charges dépend fortement de ces 6 paramètres. Cette expérience permet de confirmer leur ordre de grandeur et de réaliser quelques ajustements si l'accord n'est pas bon.

5.2.6 6^{ème} étape : confirmation de l'extraction de l'ensemble des paramètres

Après les 5 étapes précédentes, tous les paramètres ont pu être extraits. Il est important de garder en mémoire que ces extractions sont effectuées avec des incertitudes plus ou moins grandes, en fonction du paramètre étudié. Ces incertitudes dépendent de nombreux facteurs : erreurs de mesures, détermination d'un minorant ou majorant, difficulté pour isoler l'effet d'un

seul paramètre ou manque de physique dans le modèle THEMIS (émission électronique secondaire et repoussement des électrons incidents en surface par effet électrostatique non pris en compte). Le jeu de paramètre trouvé nécessite une nouvelle confirmation, en effectuant de nouveau les 5 étapes, mais de manière numérique uniquement. Les paramètres matériau sont ajustés pour améliorer l'accord entre les résultats expérimentaux et numériques (THEMIS).

En dépit des incertitudes paramétriques, notons qu'il a été possible de reproduire plusieurs expériences différentes à l'aide du modèle THEMIS. Cela montre que le jeu de paramètres trouvé est relativement fidèle aux caractéristiques du matériau. Les ordres de grandeurs trouvés pour le Téflon® FEP et le Kapton® HN sont très satisfaisants, ce qui permet de connaître avec une assez bonne précision leurs propriétés électriques. En appliquant cette procédure au sol, qui demande la réalisation et le support d'un certain nombre d'expériences, il est possible d'extraire les jeux de paramètres de n'importe quel polymère. Une bonne connaissance de leurs propriétés électriques permet alors d'extrapoler, en utilisant le modèle THEMIS, leur comportement en charge sous des environnements radiatifs non réalisables au sol. La partie suivante illustre l'extrapolation du comportement en charge du Kapton® HN, qui est l'un des matériaux les plus connus parmi les quatre autres étudiés dans ce chapitre.

5.3 Extrapolation numérique du comportement en charge d'un matériau connu : le Kapton® HN

Dans cette dernière partie, le comportement en charge du Kapton® HN est étudié sur une durée d'un mois. L'analyse de son comportement en charge n'est pas réalisable en utilisant le banc d'essai GEODUR, qui ne peut pas irradier les matériaux plus d'une journée. Les niveaux de potentiels, de champs électriques et de conductivités de ce matériau sont donc extrapolés numériquement en utilisant le modèle THEMIS.

5.3.1 Protocole d'irradiation

Le matériau est irradié avec un courant de $0,1 \text{ pA/cm}^2$, représentatif des courants moyens perçus par les matériaux dans le cadre de la charge interne. Le profil d'implantation des électrons dans ce matériau est représenté sur la Figure 5.90. On constate que la plupart des électrons sont implantés dans la première moitié du matériau. Le Kapton® HN est métallisé sur sa face avant et sa face arrière, pour être représentatif de configurations rencontrées sur les satellites, par exemple dans les cartes PCB ou les câbles électriques. Une irradiation d'un mois a été modélisée à l'aide du modèle THEMIS.

Tableau 3 : Caractéristiques du matériau étudié.

Matériau	Epaisseur	Grade	Fournisseur	Métallisation
Matériau à base de polyimide	0.5 mm	Kapton® HN	DuPont	Face avant et face arrière

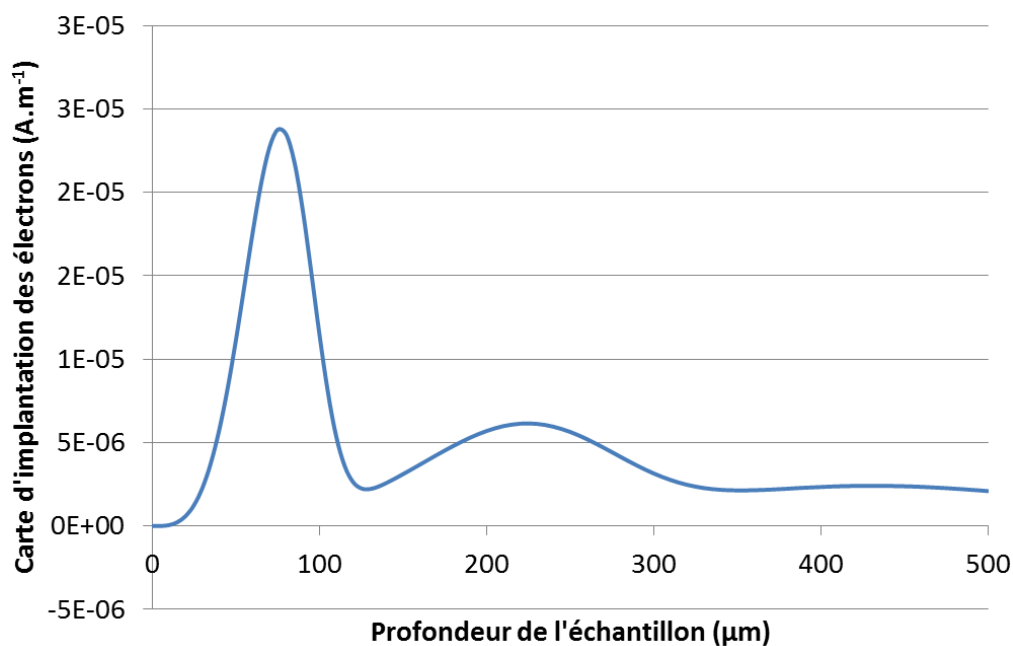


Figure 5.90 : Carte d'implantation des électrons, dans le Kapton HN, correspondant au spectre GEODUR distribué en énergies.

5.3.2 Niveaux de potentiel, de champ électrique et de conductivité

Les niveaux de champs électriques (Figure 5.91 et Figure 5.92), de potentiels (Figure 5.93 et Figure 5.94) et de conductivités (Figure 5.95) sont reportés en fonction du temps d'irradiation et de la profondeur du matériau. La conductivité totale est calculée de la manière suivante :

$$\sigma = \frac{d}{\sum_{i=0}^n \frac{\Delta x_i}{\sigma_i}} \quad (5.3.2)$$

d est l'épaisseur du matériau, Δx_i le maillage spatial et σ_i la conductivité calculée à chaque maille à l'aide des densités de charges.

Sur les Figure 5.91-5.92 et Figure 5.93-5.94, on observe deux régimes. Le premier régime, qui s'étend du début de l'irradiation jusqu'à deux ou trois jours après le début de l'irradiation, et le

second régime, qui s'étend jusqu'à la fin de l'irradiation (27 jours). Pendant le premier régime, les niveaux de champ électrique et de potentiel augmentent rapidement, jusqu'à atteindre un maximum. Pendant le deuxième régime, leurs valeurs diminuent et évoluent moins vite. Elles semblent atteindre un état quasi-stable. Sur la Figure 5.95, on constate que la conductivité suit les mêmes évolutions. Elle montre un premier régime où elle augmente rapidement sur les trois-quatre premiers jours, puis un second régime, où elle augmente bien moins vite et semble se stabiliser progressivement. Comme il a été souligné dans les chapitres 3 et 4, les comportements du premier régime sont dus principalement au rôle des trous. A mesure que l'irradiation se poursuit, ils se dé-piègent de plus en plus et la conductivité augmente. Dans le Kapton® HN, leur rôle est prédominant. Ce matériau possède une RIC suffisamment forte, qui limite une élévation trop prompte et intense des niveaux de champ électrique et de potentiel. Le second régime s'explique par les phénomènes de recombinaison, qui, progressivement, limitent l'augmentation du nombre de charges libres.

On peut noter que la RIC est constamment en évolution au cours de l'irradiation et n'admet aucun état stationnaire qui permettrait d'utiliser les autres codes de simulation 1D présentés dans la partie 5.1. En connaissant avec précision les propriétés électriques qui le caractérisent, il est possible de prédire les risques de décharges sous une irradiation de type géostationnaire. Cette connaissance permet également d'extrapoler son comportement dans des environnements radiatifs différents. La caractérisation de ce matériau n'aurait pas été possible sans une étude approfondie de ses propriétés, réalisée sur la base d'expériences faites au sol (voir partie 5.2).

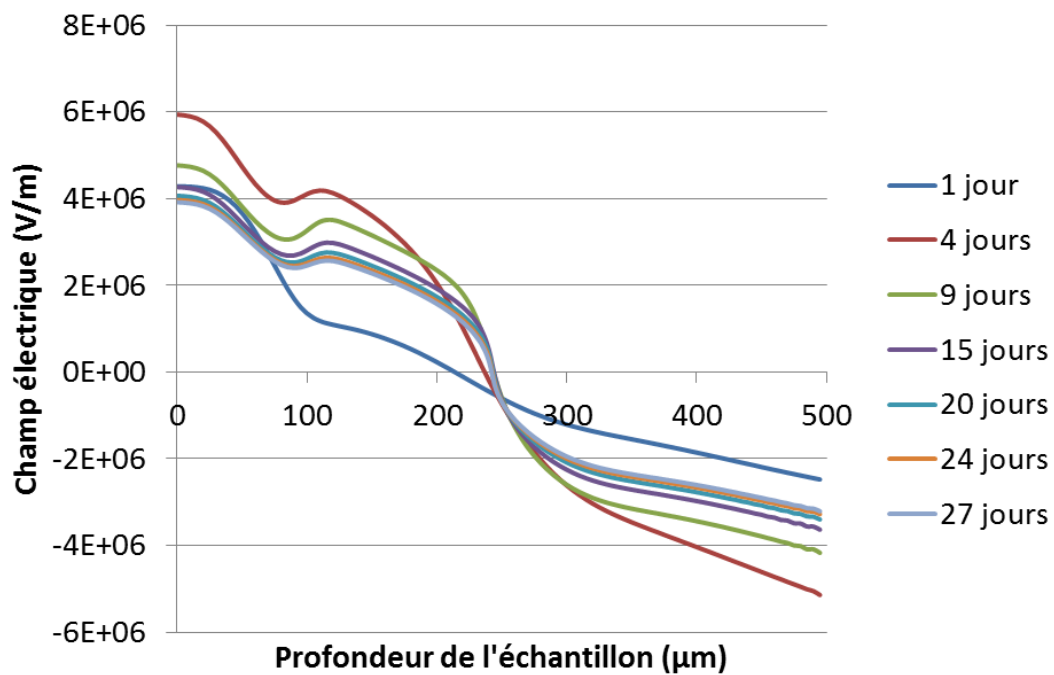


Figure 5.91 : Champ électrique en fonction du temps d'irradiation (jour) et de la profondeur du matériau (μm).

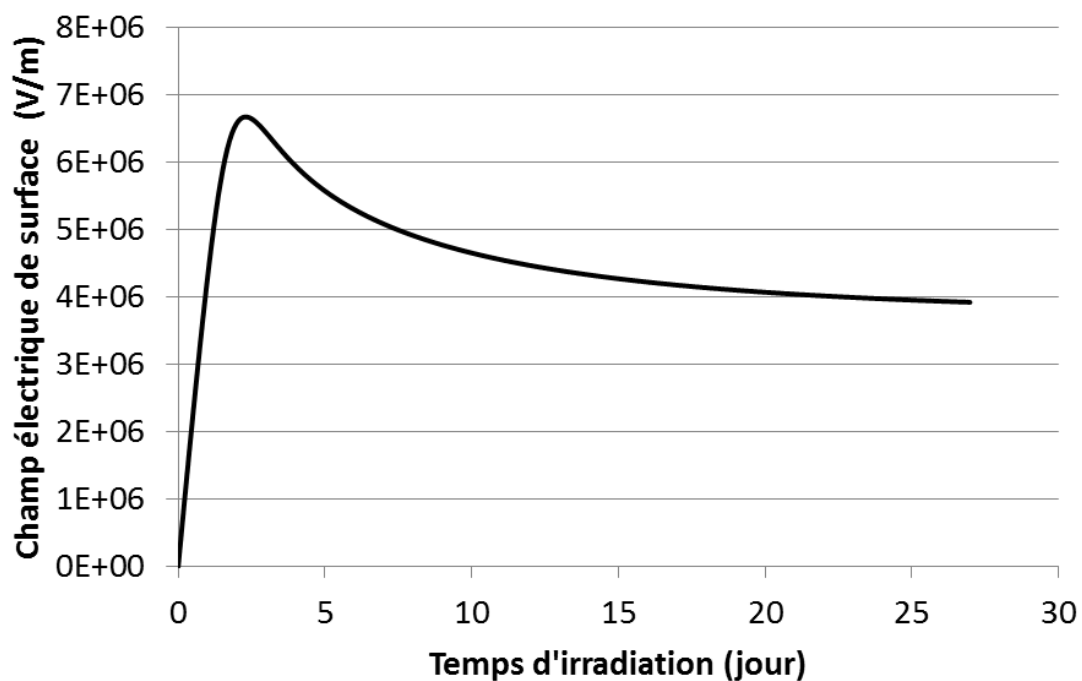


Figure 5.92 : Champ électrique en surface, à 0 μm, en fonction du temps d'irradiation (jour).

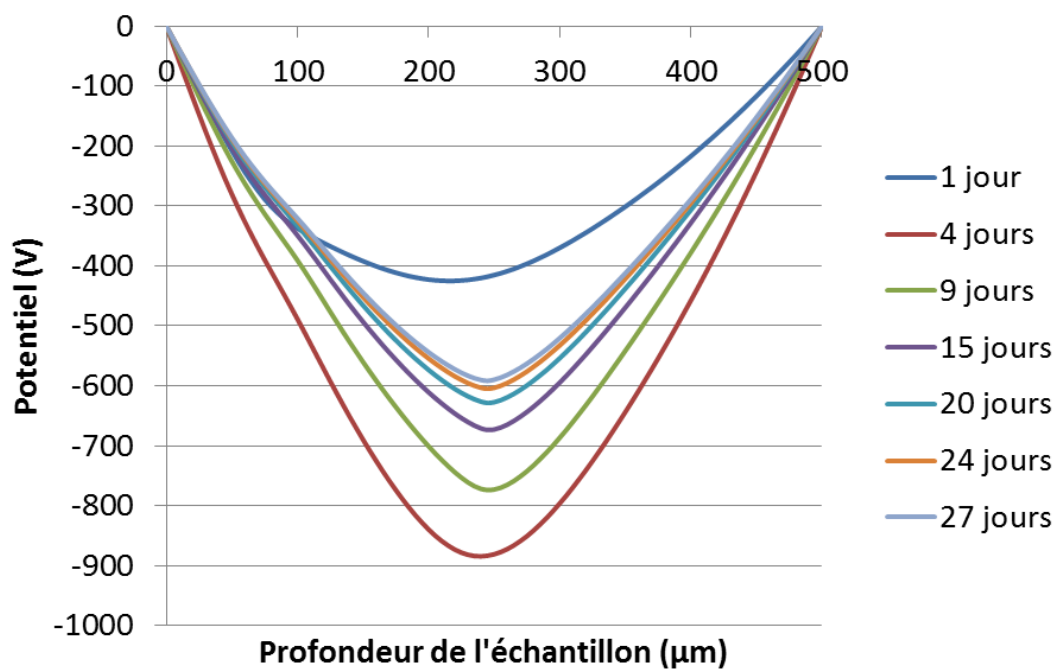


Figure 5.93 : Potentiel en fonction du temps d'irradiation (jour) et de la profondeur du matériau (μm).

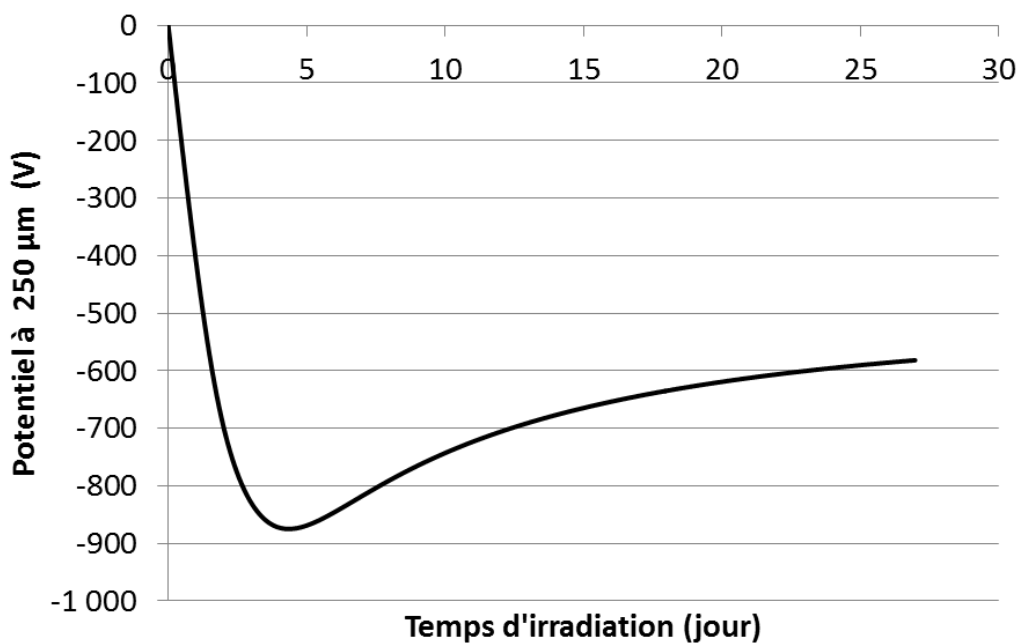


Figure 5.94 : Potentiel à 250 μm en fonction du temps d'irradiation (jour).

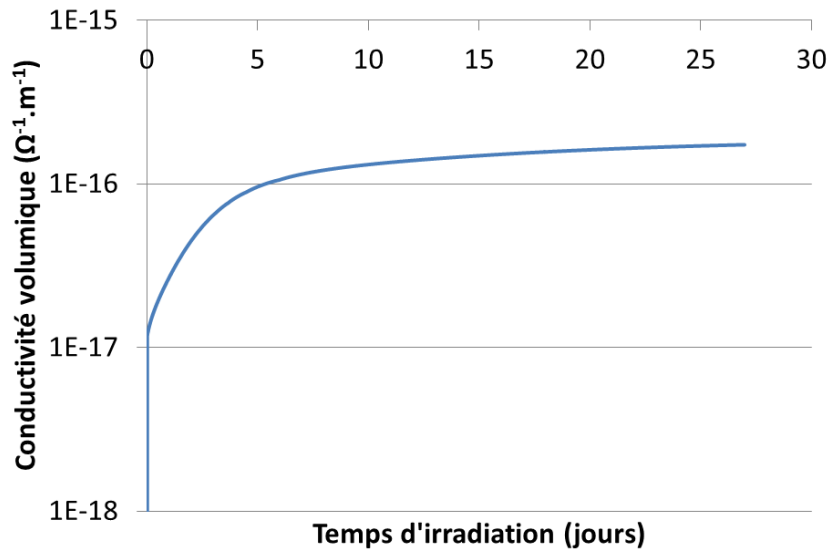


Figure 5.95 : Conductivité volumique en fonction du temps d'irradiation (jours).

5.3.3 Analyse des risques de décharges électriques

Les valeurs de champ électrique maximales observées sur la Figure 5.92 sont relativement faibles par rapport aux normes habituelles. Le champ électrique maximal rencontré quelques jours après le début de l'irradiation n'excède pas, en valeur absolue, 7×10^6 V/m. Ce champ électrique est suffisamment faible pour qu'il n'y ait pas de risque d'occurrences de décharges électriques. Après 27 jours d'irradiation, le champ électrique diminue d'un facteur 1,5 à l'endroit où il était le plus fort (en $x=0$ μm). Les risques de décharges électriques, qui étaient déjà faibles, diminuent avec le temps d'irradiation. Le même comportement est observé pour les niveaux de potentiels sur la Figure 5.94. Le potentiel maximal (-900 V) est obtenu 4 jours après le début de l'irradiation. Au cours de l'irradiation, il s'agirait du moment le plus critique en cas d'occurrence d'une décharge électrique. Après 27 jours d'irradiation, les potentiels ont diminué et atteignent -600 V.

5.4 Conclusion

Dans les chapitres précédents, le modèle THEMIS a été validé et utilisé sur deux matériaux : le Téflon® FEP et le Kapton® HN, dont le dernier a fait l'objet d'investigations plus poussées. Cette validation a été entreprise à l'aide d'expériences variées (mesures de potentiel, courant et densités de charges), en utilisant des moyens expérimentaux (enceintes SIRENE et GEODUR) qui permettent de reproduire les conditions d'irradiation observées en environnement spatial. Elle a permis de construire un modèle physique représentatif de l'interaction électron-matière et du transport de charges dans les polymères. La physique est commune à chaque polymère (piégeage, dé-piégeage, mobilité, conduction et recombinaison

des charges), mais les paramètres du modèle qui les caractérisent diffèrent d'un polymère à l'autre.

Dans ce chapitre, le modèle THEMIS a été mis en application dans le cadre de l'étude de la charge interne sur cinq matériaux : le Kapton® HN, le Néoflon® FEP, le PolyEtherEtherKetone (PEEK), l'Epoxy FR4 et le Cirlex®. THEMIS a été utilisé avec deux objectifs principaux :

- Après une étude poussée sur deux polymères (Téflon® FEP et Kapton® HN), THEMIS a été mis en application pour caractériser quatre autres polymères, dont les propriétés électriques sont moins bien connues. Pour les analyser, une méthodologie a été mise en place. A l'aide d'expériences dédiées et du modèle THEMIS, elle généralise l'extraction des propriétés électriques d'un polymère quelconque.

- Caractériser de manière précise un matériau (Kapton® HN) a permis, en utilisant THEMIS, d'extrapoler son comportement en charge sur de longues durées. Cette extrapolation est très importante puisqu'elle permet, en l'absence de données expérimentales, d'évaluer les risques de décharges électriques.

Conclusion et perspectives

L'objectif de ce travail de thèse était de comprendre les phénomènes d'interaction électron-matière et du transport de charges, en développant un modèle physique pour les polymères spatiaux, dans le cadre de la charge interne. Cela a permis, en caractérisant avec précision les propriétés électriques d'un polymère donné, de prédire son comportement en charge sous une irradiation représentative de l'environnement spatial et d'évaluer les risques d'occurrences de décharges électriques. Dans l'idéal, l'objectif d'une telle prédiction serait qu'elle soit purement numérique, pour pouvoir se soustraire complètement de toute expérience au sol (couteux en moyens et en temps). Les conclusions de ces travaux ont montré que ce n'est pas possible à l'heure actuelle. Il est encore nécessaire de construire des expériences spécifiques, dédiées à la caractérisation des propriétés électriques des polymères spatiaux. Cependant, l'étude menée pendant cette thèse a permis de définir des expériences précises qui permettent d'extraire ces propriétés matériau. Sur la base d'une méthodologie d'extraction utilisant ces résultats expérimentaux et les résultats du modèle THEMIS, il devrait être possible de caractériser la plupart des polymères à usage spatial.

Dans le cadre de cette thèse, deux polymères ont fait l'objet d'une étude poussée. Il s'agit du Téflon® FEP et du Kapton® HN, fréquemment utilisés à bord des satellites, et présentant des comportements en charge différents. Ces comportements dépendent de la physique de l'interaction électron-matière et du transport de charges. Ils varient d'un polymère à l'autre, en fonction de leurs propriétés électriques. Cette physique a pu être étudiée à l'aide du modèle THEMIS : Transport of Holes and Electrons Model for Irradiation in Space. Il est construit sur la base du modèle physique de génération-recombinaison. Ce modèle assimile le polymère à un matériau qui possède une structure de bandes : bandes de conduction, valence et interdite. Lors de la fabrication des polymères, des défauts physico-chimiques sont générés et introduisent des pièges dans la bande interdite, qui régulent la physique du transport de charges et définissent en partie leurs propriétés électriques intrinsèques. Ces propriétés sont gouvernées par le comportement des électrons et des trous qui interagissent avec les pièges. Les charges sont caractérisées par leur temps caractéristique de piégeage, de dé-piégeage, leur mobilité effective et leur probabilité de recombinaison avec la charge de signe opposé. THEMIS étend un modèle précédent, le modèle RC, déjà basé sur ce principe et développé à l'ONERA. Contrairement au modèle RC, THEMIS est un modèle 1D. Il permet d'être représentatif des spectres distribués en énergie car il prend en compte la distribution d'implantation des électrons et l'ionisation dans le volume du matériau. Il prend aussi en compte les non-uniformités des densités de charges et de champ électrique et la conduction des charges, au niveau microscopique. Finalement, il

considère les effets du champ électrique sur l'interaction électron-matière et le transport de charges. Plus précisément, l'influence du champ électrique a été prise en compte sur la génération des paires électron-trou (effet d'Onsager), leurs mobilités effectives et leurs temps caractéristiques de dé-piégeage (effet tunnel et Poole-Frenkel). Ces considérations font de THEMIS un modèle plus raffiné que la plupart des modèles existants actuellement dans la littérature scientifique. Il a permis d'améliorer notre compréhension des phénomènes physiques qui régissent le comportement en charge des polymères, sous irradiation représentative de l'environnement spatial.

Cette thèse a ensuite montré que l'analyse des propriétés électriques des polymères requiert le support d'un certain nombre d'expériences spécifiques réalisées au sol. Les résultats de mesures sur deux bancs d'essais, nommés SIRENE et GEODUR, ont été utilisés pour cette étude. Les grandeurs mesurables dans ces enceintes au sol sous irradiation sont diversifiées : le potentiel de surface (sonde Kelvin), le courant de sortie (pico-ampèremètre) et le profil de densités de charges (méthode PEA). Les irradiations ont été variées afin d'identifier les différents phénomènes, avec : un faisceau mono-énergétique de basse ou haute énergie, une succession de faisceaux mono-énergétiques d'énergies différentes ou des spectres distribués en énergie. Pour chaque cas d'irradiation, les matériaux ont été étudiés sous des configurations différentes : épaisseur variable, simple ou double métallisation et application d'un champ électrique macroscopique constant. Chaque configuration d'expérience et mesure associée ont apporté des informations complémentaires. Elles ont permis d'identifier les mécanismes physiques qui gouvernent l'interaction électron-matière et le transport de charges, et de déterminer avec un bon ordre de grandeur les propriétés électriques des matériaux. L'ensemble de ces configurations a permis d'établir une méthodologie d'extraction des paramètres matériau. Les résultats du modèle THEMIS ont été comparés avec les résultats expérimentaux, ce qui a permis d'analyser les différents effets mis en jeu, et de valider le modèle.

Sur la base des comparaisons expérience-numérique, le modèle THEMIS a été validé sur le Téflon® FEP et le Kapton® HN. Il a permis d'expliquer les évolutions temporelles et spatiales de potentiel et de conductivité expérimentales. Il a montré que les électrons et les trous ont des cinétiques de déplacement différentes, qui varient d'un polymère à l'autre. Les électrons sont généralement des espèces stables, piégées de manière permanente, tandis que les trous se piègent et se déplacent lentement. L'influence du champ électrique sur le comportement de ces charges a fait l'objet de recherches plus approfondies avec le Kapton® HN. Les travaux menés ont permis de développer un protocole expérimental, spécifiquement destiné à l'étude de cet effet. Par comparaison des résultats expérimentaux aux résultats de simulations, nos études ont montré que le champ électrique a un effet non linéaire sur la création de paires électron-trou, la mobilité effective des charges et leur taux de dé-piégeage. Cela a permis de comprendre, sur le

Téflon® FEP et le Kapton® HN, les mécanismes physiques de l'interaction électron-matière et du transport de charges responsables de la conductivité induite sous irradiation. Ainsi, il a été possible de caractériser leurs propriétés électriques. La validation du modèle physique de THEMIS a permis de l'appliquer à d'autres polymères : le NéoFlon® FEP, le PEEK, l'Epoxy FR4 et le Cirlex®. Leur comportement en charge a été analysé sous irradiation représentative de l'orbite géostationnaire. Ils présentent un comportement très dépendant du champ électrique, qui varie d'un polymère à l'autre. Pour généraliser l'étude des mécanismes physiques de l'interaction électron-matière et du transport de charges, et notamment de l'effet du champ électrique sur ces derniers, une méthodologie d'extraction des paramètres a été construite. Cette procédure est constituée de deux outils : des expériences définies et un modèle physique raffiné. Par comparaisons, il est possible d'extraire les propriétés électriques d'un quelconque polymère, sous irradiation spatiale. Cette extraction permet de le caractériser, d'extrapoler son comportement en charge et de prédire les risques d'occurrences de décharges électriques.

Il existe d'autres outils numériques que THEMIS, utilisés dans le cadre de la charge interne. Il s'agit des outils DICTAT, MCICT, NUMIT et SPIS-IC, respectivement développés par Qinetiq, l'ESA, la NASA et l'ONERA. Les outils DICTAT, MCICT et NUMIT n'utilisent pas un modèle physique représentatif des mécanismes qui gouvernent le transport de charges. Leur modèle de conductivité ne prend pas en compte les non-uniformités des densités de charges, de champ électrique, et ne considère qu'une seule espèce pour le transport de charges. De plus, il est seulement applicable quand l'état stationnaire d'un matériau est atteint, ce qui est rarement le cas dans le cadre de la charge interne. Finalement, leur modèle de l'électrostatique est très simplifié et considère le matériau en zéro dimension. Pour ces raisons, THEMIS et SPIS-IC apparaissent comme deux outils numériques adaptés pour la prédiction des niveaux de potentiels, de champs électriques et de conductivités. Ces deux outils sont complémentaires : THEMIS permet d'analyser les caractéristiques intrinsèques des polymères en 1D, et SPIS-IC permet, sur la base de ces résultats, de les extrapoler en 3D. Par rapport à THEMIS, SPIS-IC contient un modèle de conductivité plus simple et qui n'a pas encore bénéficié des dernières conclusions de cette thèse. Dans un futur proche, le modèle de conductivité de SPIS-IC devra donc être mis à jour.

Cependant, THEMIS est encore limité sur certains points, ce qui signifie que plusieurs axes d'amélioration sont possibles. Premièrement, son modèle actuel d'interaction électron-matière, construit sur la base d'équations analytiques semi-empiriques, nécessite d'être remplacé par un modèle plus précis basé sur des simulations Monte-Carlo. Le temps de calcul sera plus long, mais la précision des résultats sera plus grande et les légères incohérences entre les profils d'implantation et de génération seront résolues. Deuxièmement, les effets en température sur l'interaction électron-matière et le transport de charges n'ont pas été étudiés, bien que la

température apparaisse dans les termes de génération et de dé-piégeage. Des études doivent être envisagées avec des expériences dédiées à l'effet de la température. Ces résultats devront être comparés aux résultats de simulations. Il s'agira par exemple de mesures de potentiels de surface ou de courants sur polymères spatiaux, sous irradiation, sur des gammes de températures représentatives de l'environnement spatial (de -150°C à $+100^{\circ}\text{C}$ environ). Troisièmement, les électrons rétrodiffusés par les parois dans les bancs d'essais ou le porte échantillon ne sont pas pris en compte dans le modèle. Des études menées à l'ONERA ont montré que ces phénomènes ne sont pas négligeables, car ils augmentent les niveaux de potentiels. Quatrièmement, les phénomènes d'interfaces sont peu étudiés. A l'interface vide-diélectrique, THEMIS ne prend pas en compte l'émission d'électrons secondaires et les effets électrostatiques de déflexion sur les électrons incidents, créés par le potentiel de surface des électrons implantés. Ces phénomènes diminuent le nombre d'électrons implantés, et par conséquent, les niveaux de potentiels de surface. Ils peuvent expliquer les légères divergences de cinétiques de potentiels de surface, notamment en début d'irradiation, entre les simulations et les résultats expérimentaux. Des recherches supplémentaires devront être conduites pour analyser ces effets, et les ajouter au modèle THEMIS. A l'interface diélectrique-métal, nous avons fait l'hypothèse que la densité de pièges est identique à celle en volume. Certains auteurs suggèrent le contraire, ce qui pourrait modifier sensiblement les cinétiques de piégeage et de dé-piégeage des charges à l'interface. La dernière limitation vient du fait que le modèle est seulement 1D. Certaines expériences conduites au sol ont montré qu'il existe des courants latéraux de surface, qui ne sont pas modélisables par THEMIS. En fonction de leur importance, il est envisageable d'étendre THEMIS à un modèle 2D.

Malgré ces axes d'amélioration, les progrès réalisés sur le modèle THEMIS sont très encourageants. Ils ont permis de créer un modèle physique 1D plus représentatif de la physique de l'interaction électron-matière et du transport de charges que les modèles précédents. Du modèle physique, nous sommes passés au modèle numérique, qui permet de simuler de nombreux cas. Prochainement, il est envisagé de simuler des environnements variables tels que ceux observés lors d'une mise à poste satellite dans un cas Electric Orbit Raising (EOR), où le transfert d'orbite s'effectue par des propulseurs électriques, et le satellite entre et sort périodiquement des ceintures de radiations, sur une longue période de temps. Les risques d'occurrences de décharges électriques d'un tel cas seront évalués en utilisant THEMIS. THEMIS est aussi applicable à des systèmes multicouches, composés de matériaux différents, et soumis à des environnements radiatifs dynamiques (qui évoluent dans le temps comme le cas EOR). C'est un outil modulable, dont les possibilités d'applications sont nombreuses et qui répond à des besoins croissants de l'industrie et de la recherche aérospatiale.

Finalement, cette étude a montré que pour comprendre le comportement en charge des polymères spatiaux sous irradiation, d'autres axes de recherches sont envisageables au-delà de la modélisation. Par exemple, il s'agit d'améliorer l'outil de mesure des densités de charges : la méthode PEA sans contact. A l'heure actuelle, cette méthode manque de précision car elle possède une résolution de seulement 20 μm . Ceci n'est pas suffisant pour comprendre le transport de charges dans le matériau, qui nécessiterait de connaître les densités de charges à une précision de l'ordre du micron. Nous avons vu dans le chapitre III que cette méthode mesurait la présence de charges négatives dans le vide, à l'interface vide-polymère, ce qui n'est pas correct. La méthode PEA est donc peu fiable dans deux cas : 1) pour des matériaux fins, dont l'épaisseur est de l'ordre de grandeur de sa résolution, et 2) aux interfaces des matériaux. Or, il s'agit d'une méthode très intéressante, car elle permet de comprendre d'un point de vue quasi-microscopique le déplacement des charges et donc leur comportement (temps de piégeage, de dé-piégeage ou leur mobilité). Pour améliorer la précision d'extraction de ces paramètres, il est nécessaire de renforcer la résolution de cet instrument de mesure en travaillant sur le processus de mesure ou de déconvolution du signal. Une telle amélioration pourrait être accompagnée par des mesures en cathodoluminescence qui permettent d'étudier la distribution énergétique des défauts (pièges) dans le matériau. Ces derniers semblent conditionner le comportement des charges. En combinant ces deux techniques, il serait alors possible de renforcer notre compréhension de la cinétique de piégeage et de dé-piégeage des charges.

Annexe

Study of internal charging of four commonly used polymers through experimental and numerical analysis

Rémi Pacaud^{1*}, Thierry Paulmier^{2*}, Pierre Sarrailh^{3*}, Keith Ryden^{4**}, Alex Hands^{5**} and Denis Payan^{6***}

^{*}ONERA, 2 avenue Edouard Belin 31000 Toulouse, France

^{**}Surrey Space Centre, University of Surrey, Guildford GU2 7XH, UK

^{***}CNES, 18 Avenue Edouard Belin, Toulouse, France

¹Remi.Pacaud@Onera.fr ²Thierry.Paulmier@Onera.fr ³Pierre.Sarrailh@Onera.fr

⁴k.ryden@surrey.ac.uk ⁵a.hands@surrey.ac.uk ⁶Denis.Payan@cnes.fr

Abstract—This paper focuses on the study of internal charging of four space used polymers: Polyetheretherketone (PEEK), Fluorinated ethylene propylene (FEP), polyimide films and epoxy based material (Epoxy FR4). Experiments were carried out for each material using the GEODUR facility (Toulouse, ONERA) that mimics the geostationary space environment behind shielding. Two different irradiation currents have been applied: 1 pA/cm² and 10 pA/cm². 1 pA/cm² is used to analyze the charging behavior and the intrinsic electrical properties of each polymer. 10 pA/cm² is used to study the influence of high electric field levels on their charging behavior. In this paper, two different numerical tools used for the study of internal charging are presented: MCICT and THEMIS. MCICT has been used in the space community for several years. THEMIS has been recently developed at ONERA and is compared to MCICT. Both numerical tools showed consistent results for the 1 pA/cm² integrated current, but with deviations for the 10 pA/cm² integrated current, supposedly due to nonlinear electric field effects on charge transport. THEMIS has a more refined physical model for the conductivity than MCICT. It studies more accurately the electron-polymer interactions and the charge transport kinetics of polymers under space radiations. Subsequently, the analysis of the underlying physical phenomena responsible for the polymers charging behaviors will be carried out with THEMIS. In addition, studying these phenomena will permits to assess the risks of electrical discharges that may occur on a spacecraft in orbit (e.g GEO spacecraft), or during an elliptic trajectory (e.g sub-GEO), in an Electrical Orbit Raising case (EOR, [1]).

Index Terms—Charge density, charge transport, conductivity, dielectrics, electric field, electrostatic discharges, geostationary, internal charging, polymers, radiations, satellites.

INTRODUCTION

IN SPACE, polymers are commonly used in satellites for their good physical, optical and mechanical properties. They

have to cope with high fluxes and high energetic charged particles such as electrons or protons. The electrostatic potential levels of these materials change differently over time from one material to another [2] since polymers have different electrical properties. An example of such behavior has already been described in a previous paper [83], in which the surface potential kinetics of Teflon FEP® and Kapton HN® were compared. The experiment showed important differences in their surface potential profiles as well as high surface potential values. Such levels can lead to significantly high electric field values that can trigger electrostatic discharges (ESDs) and damage the satellite. In order to predict such events, the charging behavior of space used polymers is thoroughly studied. Two different cases of charging are identified. The first one is surface charging and the second one is internal charging ([84]–[86]). Fig. 1 is a schematic of both cases.

In the case of surface charging, the polymers are located upon the outer layers of the satellite and are the first materials to cope with space radiations. These are usually thermal blankets and solar arrays. Electrical discharges only occur between two close materials through vacuum and do not affect sensitive electronics.

In the case of internal charging, polymers are usually thick materials located in the inner parts of the satellite. They are used in circuit boards, insulator cables or connectors. Internal charging is more dangerous than surface charging since electrical discharges may occur in the material bulk itself and affect sensitive electronics of the satellite. Internal charging processes are not straightforward due to complex electric field configurations. In addition, ionising dose and charge depositions are not as simple as in surface charging. The same high energetic particles are going through the external layers of the satellite reach the inner layers and accumulate inside the material bulk (Fig. 1). For internal charging, implantation and ionization are always steered by the same incident electrons.

This paper is dedicated to the study of internal charging. The electrical properties of four different space used polymers are studied through analyses of their charging behavior. These

[†]The authors are with ONERA, The French Aerospace Laboratory, Toulouse F31055, France.

are Polyetheretherketone (PEEK, provided by VICTREX), Fluorinated ethylene propylene (FEP Neoflon®, provided by Daikin), polyimide films (Cirlex®, provided by DuPont) and epoxy based material (Epoxy FR4). These polymers are irradiated using the GEODUR facility [76] (described in section II) at ONERA. Two different integrated currents have been applied on these materials: 1 pA/cm² and 10 pA/cm². It allows studying the influence of an acceleration factor on the charging behavior. The experimental facility and protocol are detailed in section II. The experimental results are compared with the numerical results (described in section IV), obtained with two different numerical tools: THEMIS [83] and MCICT [8] (described in section III). These tools are used for the analysis of internal charging on spacecraft.

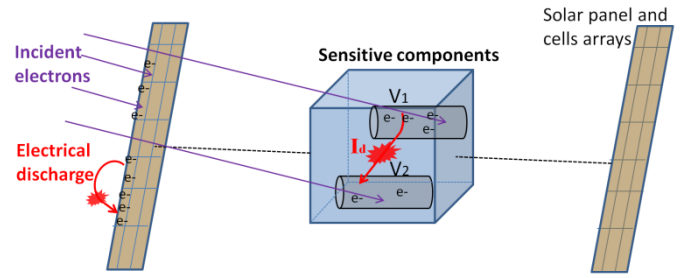


Fig. 1. Schematic presenting surface and internal charging on a spacecraft. The big blue box is the satellite core. Gray cylinders are sensitive components such as insulator cables or circuit boards. There is an electron accumulation on the solar panels and in the bulk of the sensitive components. The voltage difference between V_1 and V_2 induces an electrical discharge with a discharge current I_d that damages the materials.

EXPERIMENTAL SET-UP AND PROTOCOL

The study of internal charging was made possible through the GEODUR facility [76] installed at ONERA. The electron energy range extends from 400 keV to 2 MeV and the facility is equipped with a 2.5 MeV Van de Graff electron accelerator as well as a double scattering system for the production of a distributed electron spectrum in the energy range of 100 keV to 1 MeV. Fig. 2 shows the 1 pA/cm² integrated electron current spectrum as a function of their incident energy. Surface potential and current measurements are monitored using a Kelvin probe and a picoammeter. The temperature of the sample holder can be controlled in the range [-180°C; +250°C]. In the frame of this project, the samples are irradiated at room temperature (approximately 20°C). The facility is also equipped with a pumping system allowing an operation pressure of 10⁻⁶ hPa.

The experimental protocol is as follows: two sets of pristine samples have been tested. Each sample of each set was irradiated for 7 hours. After 7 hours of irradiation the electron beam was switched off and the samples were left being non-irradiated for another 17 hours. This is called the relaxation phase. The first set of samples was irradiated using an integrated current of 1 pA/cm². The second set of samples was irradiated using an integrated current of 10 pA/cm². Their surface potential was monitored during irradiation and relaxation. The sample thickness, composition and supplier are referred in table 1. The results are detailed in section IV.

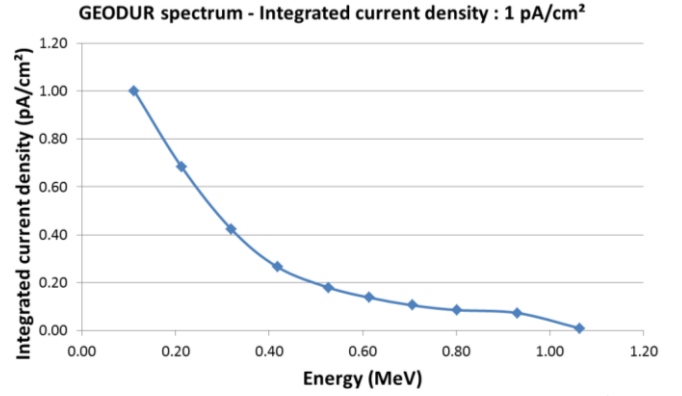


Fig. 2. GEODUR spectrum: electrons integrated current density as a function of incident energy. The total integrated current density is 1 pA/cm².

Material	Thickness	Grade	Supplier
Fluorinated ethylene propylene (FEP)	0.5 mm	FEP Neoflon®	Daikin
Polyetheretherketone (PEEK)	0.5 mm	APTIV 1000®	VICTREX
Epoxy based material	1.5 mm	Epoxy FR4	
Polyimide	1 mm	Cirlex®	DuPont

Table 1. Samples tested for the study of internal charging.

Fig. 3 represents a standard irradiation configuration of an irradiated samples for which we can monitor the surface potential V and the output current I_{out} .

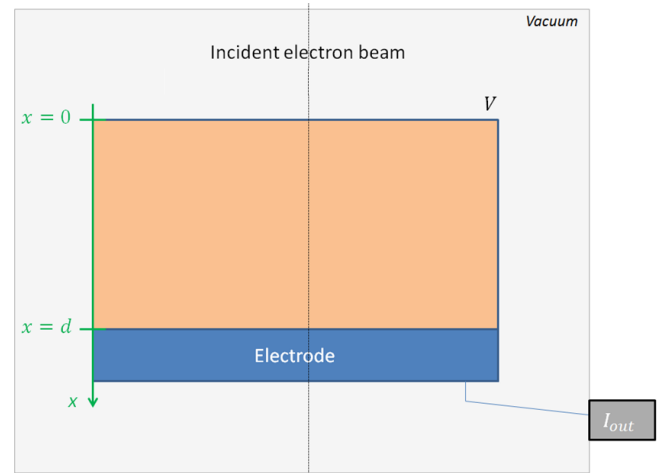


Fig. 3. One dimensional (1D) representation of a sample connected to a back face electrode and exposed to vacuum on its irradiated front face. $x=0$ represents the irradiated polymer surface and $x=d$ is the junction between the sample and the metal. V is the surface potential monitored at $x=0$ and I_{out} is the current monitored at $x=d$.

NUMERICAL TOOLS USED FOR THE STUDY OF INTERNAL

CHARGING

The THEMIS numerical tool

The Transport of Holes and Electrons Model under Irradiation in Space (THEMIS) numerical tool has already been described in a previous paper [83]. An overview of its main characteristics is presented hereunder and a more detailed description is presented in the annex section.

This tool, developed by ONERA since 2015, is used for the study of surface and internal charging. It simulates charge transport in one dimension (1D), in dielectric materials when they are irradiated with electrons under representative space conditions. Potential levels are computed with charge densities, using the Poisson equation. Conductivity levels are computed with the charge densities and the mobility of charges, such as:

$$\sigma = en\mu_n + ep\mu_p \quad (1)$$

n and p are the electrons and holes densities. μ_n and μ_p are the electrons and holes mobility. e is the charge of an electron.

Unlike any other charging tools, THEMIS distinguishes the behavior of electrons and holes. It takes into account the fact that these two species have different trapping and de-trapping kinetics. It also considers the interactions between electrons and holes through recombination processes. It computes the electron implantation [9], the dose deposition and the charge generation rate with empirical analytical equations (electron implantation and dose models were compared and validated with respect to Monte-Carlo simulations using the Casino tool [10]).

The MCICT numerical tool

The Monte-Carlo Internal Charging Tool (MCICT) is a one dimensional (1D) numerical tool, used for the description of internal charging in spacecraft. It was developed within the ESA JUICE Charging Analysis Tool project [8]. In order to assess the charge and dose deposition profiles, it uses Monte-Carlo simulations. The surface potential is computed with Ohm's law. The conductivity is computed using equations (2) to (6). In this model, the material is considered to be an RC circuit: a resistance in parallel to a capacitor.

$$\frac{dV}{dt} = \frac{d}{S\epsilon_r\epsilon_0} I_c - \frac{\sigma}{\epsilon_r\epsilon_0} V(t) \quad (2)$$

I_c is the deposited current, d the polymer thickness, S the irradiated area, σ is the total conductivity, $\epsilon_r\epsilon_0$ the electric permittivity and t the irradiation time. The total conductivity is the sum of two components. The first one is the radiation induced conductivity σ_{RIC} [11] and the second one is temperature and electric field dependent $\sigma(T, E)$ [87]:

$$\sigma = \sigma_{RIC} + \sigma(T, E) \quad (3)$$

The radiation induced conductivity can be referred as the RIC and is calculated with the following empirical equation:

$$\sigma_{RIC} = k_p \dot{D}^\Delta \quad (4)$$

k_p and Δ are experimentally derived constants and are material properties dependent. $\dot{D}$ is the dose rate. The temperature and electric field dependent component of the conductivity is obtained with equations (5) and (6):

$$\sigma_{DC}(T) = \frac{C}{kT} \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \quad (5)$$

$$\sigma(E, T) = \sigma_{DC}(T) \left(\frac{2 + \cosh\left(\frac{\beta_F E^2}{2kT}\right)}{3} \right) \left(\frac{2kT}{eE\delta} \sinh\left(\frac{eE\delta}{2kT}\right) \right) \quad (6)$$

C is determined from the room-temperature dark conductivity $\sigma_{DC}(T_0)$, E_A is the material activation energy (table 1), δ is an experimentally jump distance and $\beta_F = \sqrt{e^3/\pi\epsilon_r\epsilon_0}$. The jump distance has been set to 10 angstroms for each polymer. An overview of the main parameters of MCICT is presented in the annex section.

RESULTS AND DISCUSSION

In this section, the charging behavior of each polymer is first described with the experimental results. Then, it is explained with crossed comparisons between the experimental and numerical results (MCICT and THEMIS). A 1 pA/cm² integrated current has been used. For THEMIS, an extended case with a 10 pA/cm² integrated current has been used in order study the influence of higher electric field levels on charge transport.

Description of the experimental results

The experimental surface potential levels, obtained with the GEODUR facility as a function of irradiation time, are presented on Fig. 4.

Irradiation phase

It is observed on Fig. 4 that FEP Neoflon® has the lowest charging kinetics, followed by PEEK, Epoxy FR4 and Cirlex®. FEP Neoflon®, PEEK, Epoxy FR4 and Cirlex® charge up respectively to -250V, -1000V, -2000V and -4500V within 7 hours of irradiation. Only Cirlex® seems to have a linear increase. The other polymers present a slight curvature in their surface potential kinetics.

Relaxation phase

The surface potential of FEP Neoflon® shows a kinetic that corresponds to a fast decrease. It shows a potential drop during the first hour of relaxation, followed by a slow linear decrease during the rest of relaxation. Its surface potential decreases from -250V at the end of irradiation, to -125V at the end of relaxation, which is 50% lower. The surface potential of Cirlex® has a kinetic that corresponds to a lower decrease. We can see that this decrease is linear and its surface potential goes from -4500V to -4100V, which is 9% lower. The decrease kinetics of PEEK are similar to Cirlex® as its surface potential goes from -1000V to -900V, which is 10% lower. Epoxy FR4 has the fastest decrease kinetics. In the first 90 min of the relaxation phase, it decreases from -2000V to -1600V (20% lower). During the rest of the relaxation, it shows

the quickest linear decrease. From -1600V, it reaches -900V, which is 44% lower. These surface potential evolutions will be analyzed in section C, using the physical model of THEMIS.

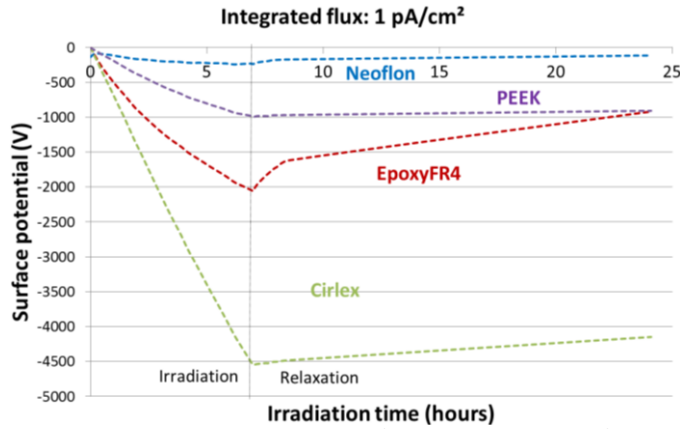


Fig. 4. Experimental (dashed lines) surface potential obtained for each polymer (FEP Neoflon®, PEEK, Epoxy FR4 and Cirlex®), with the GEODUR facility using an integrated current of 1 pA/cm².

Comparison of MCICT and THEMIS

In this section, MCICT and THEMIS simulation results are compared to the experiments. We show that MCICT cannot explain the underlying physical phenomena responsible for the different charging behaviors of each polymer. These are studied with THEMIS, in section C, as it is a more refined tool than MCICT.

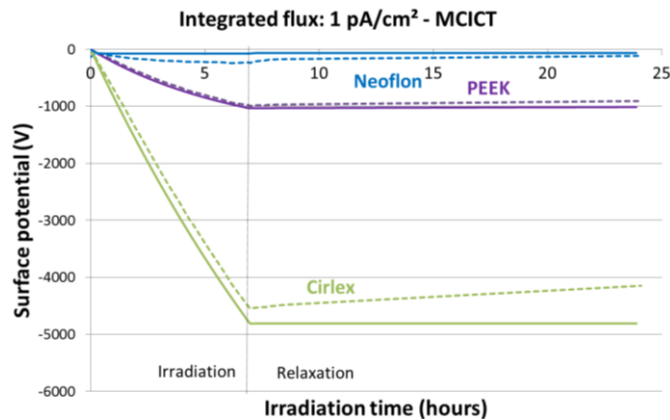


Fig. 5. Experimental (dashed lines) and numerical (continuous lines) surface potential obtained for each polymer (FEP Neoflon®, PEEK, Epoxy FR4 and Cirlex®), with the GEODUR facility, using an integrated current of 1 pA/cm², and with MCICT.

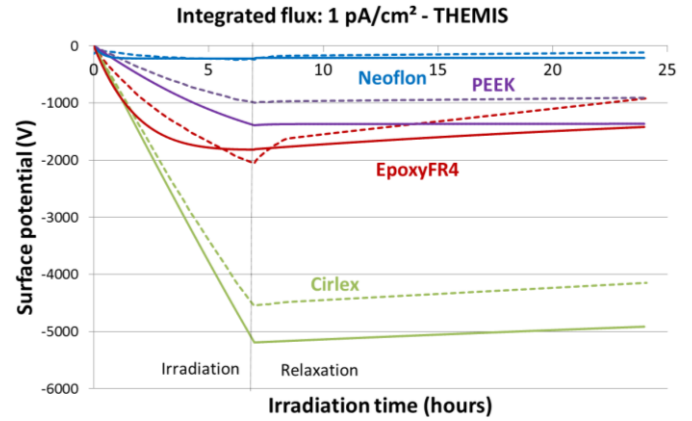


Fig. 6. Experimental (dashed lines) and numerical (continuous lines) surface potential obtained for each polymer (FEP Neoflon®, PEEK, Epoxy FR4 and Cirlex®), with the GEODUR facility, using an integrated current of 1 pA/cm², and with THEMIS.

Fig. 5 displays the crossed comparisons between the experimental results and MCICT. Due to a lack of information on the electrical intrinsic properties of Epoxy FR4, it was not possible to run simulations with MCICT on that polymer. For PEEK, the numerical results yielded by MCICT are in very good agreement with the experiments during the irradiation. Both the kinetics and surface potential values are well represented. The relative error is low during both phases. It reaches its highest value at the end of relaxation: only 11%. However, MCICT shows a steady state during relaxation, related to a low dark conductivity, which is not seen in the experiments. If the relaxation kept going, it would mean that the relative error would increase linearly with time. For Cirlex®, only the irradiation phase is in very good agreement. During the relaxation phase, the experimental results show a slow decrease in the surface potentials kinetics, whereas MCICT shows a steady state instead. After 17 hours of relaxation, it gives a discrepancy of 800V. MCICT fails to represent the potential decrease, and the error would increase if relaxation kept going. For FEP Neoflon®, the numerical surface potential values are not representative of the experiments as the relative error is superior to 100%. In addition, MCICT shows a plateau (-65V) during both irradiation and relaxation phases, whereas the experiments show a fast decrease kinetics.

Fig. 6 displays the crossed comparisons between the experimental results and THEMIS. For Epoxy FR4, the relative error between the numerical and experimental results is significant (often superior to 20% or 30%), during both phases. The kinetics is not well represented. THEMIS shows a strong bending during irradiation, which is not seen in the experiments. During relaxation, the slopes are different, which means that the discrepancy increases with time. The relative error reaches 67% at the end of relaxation, which would increase if relaxation kept going. For PEEK, the simulation results do not yield as good results as MCICT. Although the overall kinetics show a quite good agreement (linear increase during irradiation and very slow decrease during relaxation), the relative error is still high. It increases and reaches 40% at the end of irradiation and 50% at the end of relaxation. For Cirlex®, the agreement is a slightly worse than MCICT during irradiation (relative error of 14% for THEMIS and 6% for MCICT), but much better during relaxation. Although

THEMIS shows a slightly higher relative error, it is very good at representing the decrease kinetics. For THEMIS, if the relaxation kept going, the relative error would not increase, unlike MCICT. The slopes of numerical and experimental results are almost identical. For FEP Neoflon®, the agreement is better with THEMIS than MCICT. Although THEMIS also displays a steady state during the relaxation phase, the relative error with the experiments is much lower.

There are, as stated in the previous paragraph, discrepancies between the experiments and the numerical results of MCICT and THEMIS. However, the conductivity model of MCICT cannot explain the underlying physical phenomena that steer charge transport. This is a quite simple physical model, based work by J. Fowler [11], who made the hypothesis that an induced equilibrium current has to be reached. To be verified, this hypothesis requires that the generation rate of electron-hole pairs must be in equilibrium with the recombination rate between electrons and holes. This hypothesis is not verified as the current varies over time, which is confirmed with the temporal evolution of the surface potential (Fig. 4). In addition, the σ_{RIC} is not electric field dependent, as it should be. It has been shown in a previous paper [88] that the electron-polymer interaction is electric field dependent. The physical parameters of MCICT, such as k_p or Δ , are not related to physical processes in such a case. The agreement of MCICT with the experimental results is only due to the fact that the conductivity parameters are fitted to work in this range of irradiation conditions. Therefore, the physical model of MCICT is not suited for explaining the underlying physical phenomena that steer charge transport. For these reasons, in order to understand the electron-polymer interactions and the charge transport kinetics, the physical model of THEMIS is used in section C to describe the charging behavior of the aforementioned polymers.

Analysis of the experimental results based on the physical model of THEMIS

THEMIS distinguishes the behavior of electrons and holes and computes their densities using Nonlinear Partial Differential Equations (NPDE). Extracting the parameter of these NPDE from dedicated experiments, it allowed getting a good approximation for the polymers intrinsic physical properties: gap energy, trapping time, de-trapping time, mobility of charges and Schubweg constant ([79] and [78] – electrons and holes lifetime-mobility product – $\tau_n\mu_n$, $\tau_p\mu_p$). These parameters enable understanding the electron-polymer interactions and charge transport on a microscopic scale. Based on the NPDE and the physical parameters, the convection currents of charges and the bulk conductivity profiles ($\sigma = en\mu_n + ep\mu_p$) are computed as a function irradiation time.

Integrated current: 1 pA/cm²

In this section, polymers are compared in pairs. FEP Neoflon® and PEEK are first compared to each other, followed by PEEK and Cirlex®, Cirlex® and Epoxy FR4, and Epoxy FR4 and PEEK.

Irradiation phase

FEP Neoflon® and PEEK: at the very beginning of irradiation, when the surface potential is low, the initial potential slope only differs with the material thickness and relative permittivity. It can be seen by simplifying the equation (2) at $t = 0$:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{d}{s\epsilon_r\epsilon_0} I_c \quad (7)$$

Since FEP Neoflon® has the same thickness as PEEK, but a relative permittivity lower by a factor of 1.7, it has a lower charging kinetics for short irradiation times as it can be seen on Fig. 6. After several hours of irradiation, we notice that FEP Neoflon® had already reached a steady state (-250V). PEEK reaches -1000V at the end of irradiation, but no steady state is observed. If the irradiation kept going, the surface potential of PEEK would still increase. Such differences in charging kinetics cannot be solely ascribed to the relative permittivity. This difference should be due to conductivity intrinsic parameters.

First, the Schubweg constants of electrons and holes have been analyzed in order to know whether they differ between FEP Neoflon® and PEEK. THEMIS results showed that they have close intrinsic physical parameters, which means that their Schubweg constants are similar. The difference in their charging kinetics is thus ascribed to the electron-polymer interaction.

Second, the effective gap energy of the material has been investigated. It has been found with THEMIS that this effective gap energy differs by a factor of 100 between PEEK and FEP Neoflon®. It means that, for one incident electron, the creation yield of electron-hole pairs within the material is one hundred times lower for PEEK than for FEP Neoflon®: the number of generated holes from the irradiation is much lower for PEEK. Subsequently, the holes conduction currents have a weaker contribution in the case of PEEK, and do not counterbalance as well as FEP Neoflon® the surface potential increase due to the electron implantation.

The holes conduction currents (J_p) have been plotted on Fig. 7 as a function of the material thickness. The gradients of these conduction currents (∇J_p) have been computed and plotted on Fig. 8. They represent the holes accumulation rate as a function of the position inside the material. Based on Fig. 7 and Fig. 8, it confirms that the number of holes that reaches the surface sample of FEP Neoflon® is greater than for PEEK.

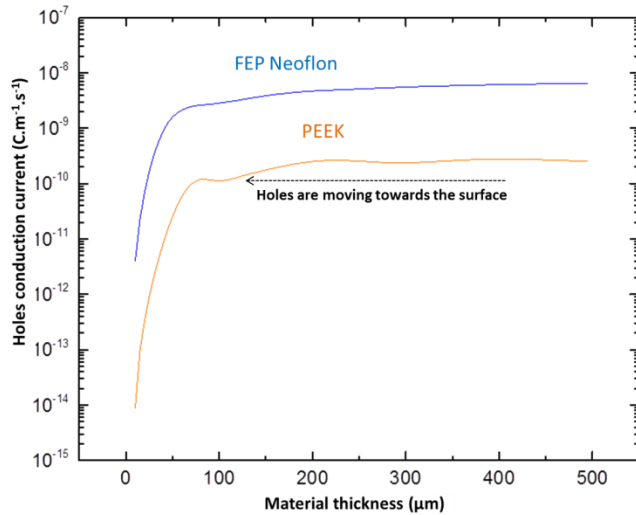


Fig. 7. Holes conduction currents computed by THEMIS for FEP Neoflon® and PEEK as a function the samples thickness.

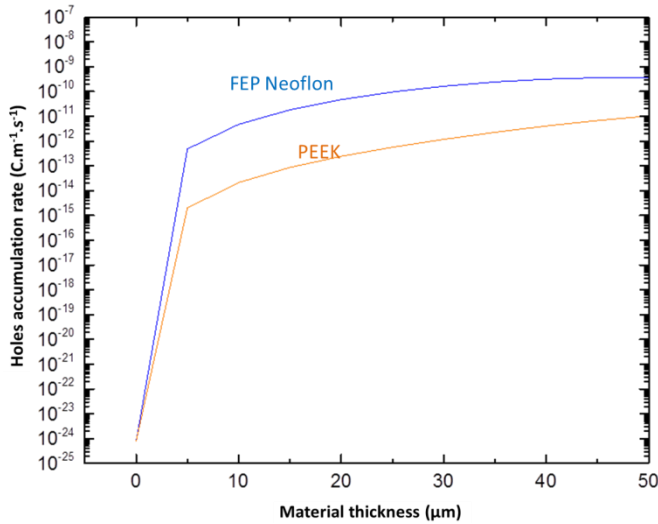


Fig. 8. Holes accumulation rate computed by THEMIS for FEP Neoflon® and PEEK as a function the samples thickness, within the first 50 μm of the sample.

Finally, the bulk conductivities of FEP Neoflon® and PEEK have been compared in Fig. 9 as a function of the irradiation time with THEMIS results. It shows that, during irradiation, $\sigma_{PEEK} < \sigma_{FEP\ Neoflon®}$.

PEEK and Cirlex®: Cirlex® and PEEK have a very close relative permittivity, but Cirlex® is twice as thick as PEEK. It means that its capacitance is twice as low and explains that, for short irradiation times, a steeper charging kinetics is observed in Fig. 6. For longer irradiation times, a slight bending is observed for PEEK surface potential kinetics. It is not the case for Cirlex®. In addition, after 7 hours of irradiation, the surface potential of Cirlex® (-4500V) is 4.5 times higher than PEEK (-1000V). In order to explain this behavior, the electrons and holes Schubweg constants were assessed and compared between Cirlex® and PEEK. It was found that the electrons and holes Schubweg constants of PEEK are four orders of magnitude higher than Cirlex®. It means that electrons and holes in PEEK are highly mobile under the influence of an electric field. Subsequently, PEEK is more sensitive to the electric field effect than Cirlex® and explains that $\sigma_{Cirlex®} < \sigma_{PEEK}$ (Fig. 9).

Cirlex® and Epoxy FR4: Although Cirlex® is thinner than Epoxy FR4, it presents higher surface potential levels in Fig. 6. It is ascribed to a much higher holes Schubweg constant from Epoxy FR4. It is five orders of magnitude higher than Cirlex®, which means that holes in Epoxy FR4 are highly mobile under the influence of an electric field. These holes, generated in the material bulk, move towards the surface sample and counterbalance the surface potential increase rate due to the electron implantation. Therefore, during irradiation, the bulk conductivity of Epoxy FR4 is higher than Cirlex® as seen in Fig. 9: $\sigma_{Cirlex®} < \sigma_{Epoxy\ FR4}$.

Epoxy FR4 and PEEK: PEEK is three times thinner than Epoxy FR4 but presents ten times lower conductivity levels (Fig. 9). Similarly to Cirlex®, it is ascribed to the PEEK holes Schubweg constant, which is three orders of magnitude lower than Epoxy FR4.

Relaxation phase

FEP Neoflon® shows a significant surface potential decrease during relaxation. THEMIS ascribes this behavior to a high Schubweg constant for free holes. They are not instantaneously trapped, but remain free for a short amount of time. During this period, due to a very high hole mobility, they have time to reach the sample surface and lower the surface potential levels. The conductivity of FEP Neoflon® has been plotted in Fig. 9 and shows a quick drop. It is due to an instantaneous trapping time for electrons, a very short trapping time for holes and a permanent trapping for both charges.

Cirlex® and PEEK both show slow surface potential decrease, but not for the same reasons. For Cirlex®, THEMIS ascribes this behavior to the fact that, in comparison to FEP Neoflon®, holes have both a low mobility and a quick trapping time. The hole Schubweg constant of Cirlex® is four orders of magnitude below the hole Schubweg constant of FEP Neoflon®. For PEEK, THEMIS ascribes this behavior to a very low hole mobility. Although holes have a longer trapping time than FEP Neoflon® (as it can be seen in Fig. 9 due to a long conductivity decay), they are very slow at reaching the sample surface. The conductivities of Cirlex® and PEEK have been plotted and compared in Fig. 9. Unlike PEEK, the conductivity of Cirlex® drops at the beginning of relaxation. The trapping time of holes and electrons are much lower than for PEEK. However, after 2 hours of relaxation, the conductivity of Cirlex® is higher than PEEK. It is due to the fact that holes in Cirlex® have a low de-trapping characteristic time. They do not get permanently trapped, which explains that the bulk conductivity of Cirlex® remains high during relaxation.

Epoxy FR4 presents a very fast decrease kinetics in its potential levels. It is ascribed to a very high hole Schubweg constant, five orders of magnitude higher than Cirlex® and more than 1 time higher than FEP Neoflon®. In addition, it has a low hole de-trapping characteristic time and a high electric field dependence on de-trapping, which explains that its conductivity levels remain high during relaxation.

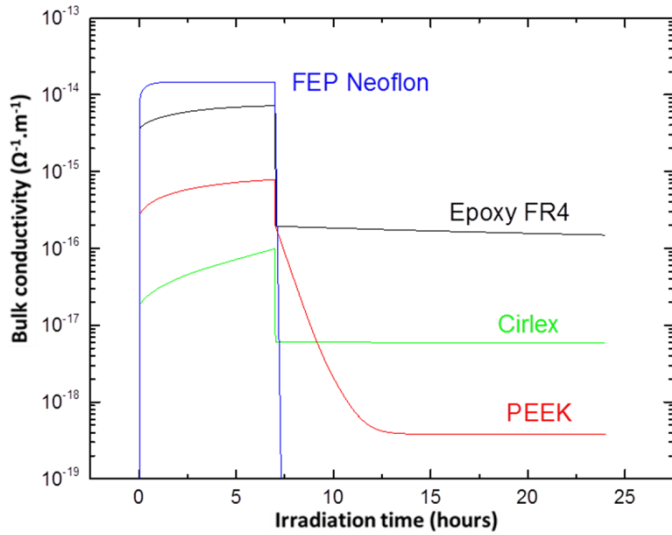


Fig. 9. Bulk conductivities computed with THEMIS as a function of irradiation time.

Integrated current: 10 pA/cm²

Fig. 10 displays the crossed comparisons between the experimental results and THEMIS for an integrated current of 10 pA/cm². The relaxation phase is not displayed since an electrostatic discharge occurred in one of the polymers at the end of irradiation. It created a plasma cloud that expanded and neutralized all the samples.

In this experiment, an acceleration factor has been applied on the integrated current in order to study the effect of high electric field values on charge transport. Increasing the integrated current with a factor of 10 did not increase the surface potential values with the same factor. The surface potential levels for FEP Neoflon®, PEEK, Epoxy FR4 and Cirlex® after 6 hours of irradiation are respectively: -900V, -2100V, -9400V and -9600V. In addition, the surface potential kinetics of Epoxy FR4 and Cirlex® show a strong bending. Based on these results, it seems that Epoxy FR4 and Cirlex® have the strongest electric field dependence.

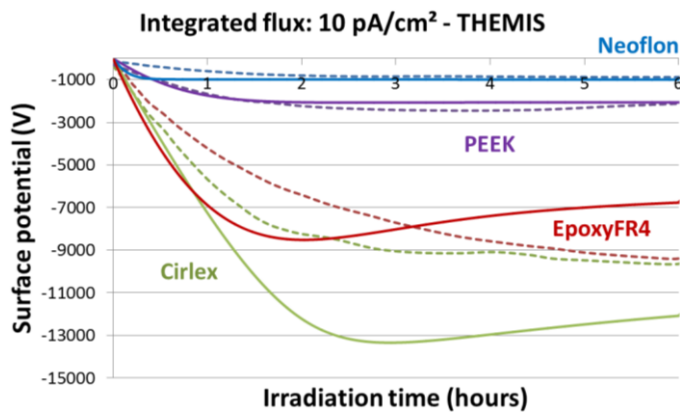


Fig. 10. Experimental (dashed lines) and numerical (continuous lines) surface potential obtained for each polymer (FEP Neoflon®, PEEK, Epoxy FR4 and Cirlex®), with the GEODUR facility, using an integrated current of 10 pA/cm², and with THEMIS.

The numerical results do not agree as well with the experimental results as they did with the 1 pA/cm² integrated current. It can be ascribed to nonlinear electric field effects on

the electron-polymer interactions and other underlying physical phenomena that steer charge transport.

In a previous paper [88], a study performed on Kapton® HN (a polyimide based material), using THEMIS, analyzed its surface potential levels. It showed that the electron-polymer interactions have a nonlinear dependence with the electric field and the temperature. This is called the geminate recombination, which has initially been described by L. Onsager [16]. This dependence has only been described for Kapton® HN and has not been studied for the polymers presented in this paper. Further studied should be envisaged in order to confirm this dependence.

In THEMIS, the electric field dependence has been taken into account into the electrons/holes mobility and de-trapping rate, with the Poole-Frenkel effect [89]. This effect has been studied for Kapton® HN, but it is likely that the polymers studied in this paper behave differently with the electric field. If the other polymers do follow a Poole-Frenkel law, it should only mean that the current set of parameters has to be improved, or that a real study on the effect of the electric field is needed, as done in [88].

Assessment of electrical discharges

This study final objective is to assess the risks of electrical discharges between a polymer and a metal, in realistic irradiation cases. It showed that, from one polymer to another, the charging behavior varies with the integrated current. With a 1 pA/cm² integrated current, the potential levels of the four studied polymers are lower than with the 10 pA/cm² integrated current. The latter induces a higher risk of electrical discharges. These risks also vary with the material geometry and its intrinsic electrical properties. However, polymers that get highly charged under electron irradiation are not necessarily the most dangerous materials. The relaxation ability of a material must be considered in an equivalent way as the charging ability. In order to understand this, we consider hereafter two irradiation cases. The first case takes place during a continuous irradiation period of time (for example a GEO spacecraft in a GEO space storm), and the second during successive irradiation and relaxation phases (for example with an elliptic trajectory, during an Electric Orbit Raising case, EOR, [1]).

a) During a continuous irradiation case of a GEO spacecraft, charging events occur during a space storm. The whole process is a transient event (taking into account the time to populate the radiation belts and the relaxation phase) that usually lasts from one to three weeks. During that period of time, polymers cope with high fluxes of charged particles that get implanted in the bulk [90]. An electrical breakdown occurs more easily for Epoxy FR4 than for PEEK, since Epoxy FR4 has a higher charging kinetics (Fig. 4).

b) During an EOR case [90], when a satellite is set into orbit and has an elliptic trajectory, it periodically enters and leaves the radiation belts and consecutively undergoes irradiation and relaxation phases. When the satellite leaves the radiation belts, the surface potential levels of Epoxy FR4 may have time to decrease by relaxation, whereas this is not the case for PEEK. The latter may have a worse relaxation kinetics in comparison to Epoxy FR4, which means that the

risks of electrical discharges are probably greater in this irradiation case for PEEK.

CONCLUSIONS AND PROSPECTS

A study based on four space used polymers (FEP Neoflon®, PEEK, EpoxyFR4 and Cirlex®) has been carried out in this paper. The main objective was to understand their charging behavior by understanding the physical effects that steer the electron-polymer interactions and charge transport. This study allowed us comparing two numerical tools used for the study of internal charging.

1) Analysis of the charging behavior and charge transport

Firstly, the polymers charging behavior has been studied under a 1 pA/cm² integrated current with two different numerical tools: MCICT and THEMIS. THEMIS showed similar results to MCICT, but it is built on a more refined model. Subsequently, it allowed understanding charge transport at a microscopic scale. It not only distinguishes the behavior of electrons and holes, but it also showed that holes have a major role in charge transport, due to their Schubweg constant.

Secondly, their charging behavior was studied using a 10 pA/cm² integrated current. Higher fluxes lead to higher electric field levels, which showed nonlinear effects on charge transport. The numerical results did not agree as well as the 1 pA/cm² integrated current. THEMIS ascribed these discrepancies to nonlinear electric field effects on the de-trapping characteristic time and mobility of charges (Poole-Frenkel effect). A previous study [88], performed on Kapton HN®, showed the significance of these effects on charge transport, but it was carried out on another polymer, different from the ones studied in this paper. Further studies should be considered in order to know whether the Poole-Frenkel effect prevails in these materials.

The overall discrepancies between the experimental and numerical results may partly be explained to backscattered electrons on the chamber walls that are not taken in account in the simulations. A previous study led at ONERA showed that the number of backscattered electrons depends on the applied integrated current. This number can take values up to one third of the incident flux that should modify the charging behavior of the polymers.

2) Comparison of MCICT and THEMIS

The comparison of 2 different numerical tools was performed. MCICT and THEMIS both showed a good agreement with low integrated fluxes and slightly worse with high integrated fluxes. The input parameters used for the conductivity calculation in MCICT have no physical meaning and its physical model cannot explain the physical underlying processes that steer charge transport, which, on the contrary, THEMIS is able to do. The latter distinguishes the behavior of electrons and holes and enables a more thorough description for the physics of charge transport. It computes the surface potential, the bulk conductivity and the convection currents of charges using partial differential equations. These NPDE take into account the materials radiative history. The physical

model of THEMIS allows studying more complicated irradiation cases, such as Electric Orbit Raising, with time-dependent electrons spectra and various configurations: different material geometries, electric field levels, temperatures, etc.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors thank the region Occitanie and ONERA for their Ph.D funding, for Rémi Pacaud. This work has been performed in collaboration with the Surrey Space Centre, University of Surrey. In addition, the authors thank the CNES for its R&T program, which enabled carrying out this study.

REFERENCES

- [1] E. Y. Choueiri, A. J. Kelly, et R. G. Jahn, « Mass savings domain of plasma propulsion for LEO to GEO transfer », *J. Spacecr. Rockets*, vol. 30, n° 6, p. 749-754, nov. 1993.
- [2] R. Hanna *et al.*, « Radiation Induced Conductivity in Teflon FEP Irradiated With Multienergetic Electron Beam », *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 41, n° 12, p. 3520-3525, déc. 2013.
- [3] R. Pacaud, T. Paulmier, et P. Sarraïlh, « 1-D Physical Model of Charge Distribution and Transport in Dielectric Materials Under Space Radiations », *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 45, n° 8, p. 1947-1954, août 2017.
- [4] K. A. Ryden, A. D. P. Hands, C. I. Underwood, et D. J. Rodgers, « Internal Charging Measurements in Medium Earth Orbit Using the SURF Sensor: 2005–2014 », *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 43, n° 9, p. 3014-3020, sept. 2015.
- [5] A. Hands et K. Ryden, « Experimental Measurement of Low-Intensity and Long-Duration Internal Charging Behavior », *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 45, n° 8, p. 1938-1946, août 2017.
- [6] J.-C. Matéo-Vélez, A. Sicard, D. Payan, N. Ganushkina, N. P. Meredith, et I. Sillanpää, « Spacecraft surface charging induced by severe environments at geosynchronous orbit », *Space Weather*, vol. 16, n° 1, p. 89-106, janv. 2018.
- [7] T. Paulmier, B. Dirassen, M. Belhaj, V. Inguibert, D. Payan, et N. Balcon, « Experimental test facilities for representative characterization of space used materials », p. 7, 2014.
- [8] F. Lei, D. Rodgers, et P. Truscott, « MCICT - MONTE-CARLO INTERNAL CHARGING TOOL », p. 6, 2016.
- [9] « Lima. W and Poly. CR. D, "Generalized empirical equation for the extrapolated range of electrons in elemental and compound materials", International Atomic Energy Agency, Vienna (Austria); 359 p; ISSN 1011-4289; Worldcat; Mar 1999; p. 249-256; Symposium on techniques for high dose dosimetry in industry, agriculture and medicine; Vienna (Austria); 2-5 Nov 1998 ». .
- [10] H. Demers *et al.*, « Three-dimensional electron microscopy simulation with the CASINO Monte Carlo software », *Scanning*, vol. 33, n° 3, p. 135-146, mai 2011.
- [11] J. F. Fowler, « X-Ray Induced Conductivity in Insulating Materials », *Proc. R. Soc. Math. Phys. Eng. Sci.*, vol. 236, n° 1207, p. 464-480, sept. 1956.
- [12] V. Adamec et J. H. Calderwood, « Electrical conduction in dielectrics at high fields », *J. Phys. Appl. Phys.*, vol. 8, n° 5, p. 551-560, avr. 1975.
- [13] R. Pacaud, T. Paulmier, et P. Sarraïlh, « Electric field dependence on the conductivity of Kapton-HN: Integration into a 1D physical model used for the description of charge transport in dielectric materials under space environment », *J. Appl. Phys.*, vol. 122, n° 24, p. 245106, déc. 2017.
- [14] G. M. Sessler et G. M. Yang, « Charge transport in Teflon and Kapton », 1995, p. 630-633.
- [15] H. Seggern, B. Gross, et D. A. Berkley, « Constant hole schubweg in Teflon FEP (fluorinated ethylene propylene copolymer) », *Appl. Phys. Solids Surf.*, vol. 34, n° 3, p. 163-166, juill. 1984.
- [16] L. Onsager, « Initial Recombination of Ions », *Phys. Rev.*, vol. 54, n° 8, p. 554-557, oct. 1938.
- [17] S. D. Ganichev, E. Ziemann, W. Prettl, I. N. Yassievich, A. A. Istratov, et E. R. Weber, « Distinction between the Poole-Frenkel and tunneling models of electric-field-stimulated carrier emission from

deep levels in semiconductors », *Phys. Rev. B*, vol. 61, n° 15, p. 10361-10365, avr. 2000.

- [18] R. B. Horne et D. Pitchford, « Space Weather Concerns for All-Electric Propulsion Satellites: ALL-ELECTRIC PROPULSION », *Space Weather*, vol. 13, n° 8, p. 430-433, août 2015.
- [19] J. Boch, F. Saigne, L. Dusseau, et R. D. Schrimpf, « Temperature effect on geminate recombination », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 89, n° 4, p. 042108, juill. 2006.

ANNEX

The THEMIS numerical tool

In order to assess the potential V , the Poisson equation is associated with a Robin and a Dirichlet boundary condition. These boundary conditions mimic respectively the electric field behavior in vacuum and the metal interface. They are described by the first, second and third equations of system (1).

$$\begin{cases} -\Delta V(x) = \frac{\rho(x)}{\varepsilon} \\ \nabla V(x)|_{x=0} - \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon} \frac{V(x)}{L} = 0 \\ V(d) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

In system (1), V is the potential, ε is the dielectric permittivity, ε_0 is the vacuum permittivity, d represents the material length, L is the distance between the front surface material and the first surface electrically grounded and ρ is the total charge density described by equation (2).

$$\frac{\rho(x)}{e} = -n(x) + p(x) - n_t(x) + p_t(x) \quad (2)$$

e is the elementary charge (C), n is the density of free electrons (m^{-3}), p is the density of free holes (m^{-3}), n_t is the density of trapped electrons (m^{-3}) and p_t is the trapped holes density (m^{-3}).

As mentioned before, the THEMIS tool distinguishes the behavior of electrons from the behavior of holes. Equations of system (3) represent respectively the free electrons, trapped electrons, free holes and trapped holes time derivative function.

$$\begin{cases} \frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = g(x,t) - \frac{\nabla \cdot j_0}{e} - \nabla \cdot J_n - R_1 - R_2 - \frac{n}{\tau_n} + \frac{n_t}{\tau_{nt}} \\ \frac{\partial n_t(x,t)}{\partial t} = -R_3 + \frac{n}{\tau_n} - \frac{n_t}{\tau_{nt}} \\ \frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = g(x,t) + \nabla \cdot J_p - R_3 - R_2 - \frac{p}{\tau_p} + \frac{p_t}{\tau_{pt}} \\ \frac{\partial p_t(x,t)}{\partial t} = -R_1 + \frac{p}{\tau_p} - \frac{p_t}{\tau_{pt}} \\ J_n(x,t)|_{x=0} = 0 \\ (\nabla \cdot J_n)|_{x=d} = 0 \\ J_p(x,t)|_{x=0} = 0 \\ (\nabla \cdot J_p)|_{x=d} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

These functions are dependent of several terms: $g(x,t)$ is the generation rate of free electrons and holes ($\text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$). It is electric field dependent as described in a previous paper [88]. $\nabla \cdot j_0$ is the incident electrons implantation current in the material ($\text{C} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$); τ_n , τ_{nt} , τ_p and τ_{pt} are respectively the trapping characteristic time and the de-trapping characteristic time for electrons and holes (s^{-1}). The de-trapping characteristic time of holes is electric field dependent as described in [88].

In system (3) we set two boundary conditions. For the first one we chose the electrons and holes current to be zero at the boundary between the polymer and vacuum. For the second one an unlimited current of free populations at the metal/dielectric interface has been chosen.

The electrons and holes current densities are computed with system (4).

$$\begin{cases} J_n = J_n^{\text{Convection}} + J_n^{\text{Diffusion}} = n\mu_n E + D_n \nabla n \\ J_p = J_p^{\text{Convection}} + J_p^{\text{Diffusion}} = p\mu_p E + D_p \nabla p \end{cases} \quad (4)$$

System (4) describes the electrons current density, J_n ($\text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$), and the holes current density J_p ($\text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$). μ_n and μ_p are the electrons and holes mobility. D_n and D_p are their diffusion coefficients. The total current density is the sum of the convection and diffusion current density. In [88] it has been showed that conductivity in Kapton HN is steered by the electric field. We think it can be extended to other polymers. This dependence was added to the model and taken into account as described in a previous paper [88].

System (5) describes the recombination terms between electrons and holes. R_1 corresponds to the recombination of free electrons with trapped holes ($\text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$). R_2 corresponds to the recombination of free electrons with free holes ($\text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$). R_3 corresponds to the recombination of free holes with trapped electrons ($\text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$).

$$\begin{cases} R_1 = \alpha_1 n p_t \\ R_2 = \alpha_2 n p \\ R_3 = \alpha_3 n_t p \end{cases} \quad (5)$$

Table 1 summarizes the different input parameters required by the THEMIS numerical tool. There are 15 parameters but some of them are either neglected or assessed from others. Therefore, it is possible to reduce the number of parameters down to 10. Their values change from one polymer to the other and are determined with crossed comparisons between experimental and numerical results.

Symbol	Designation	Unit (SI)
τ_n	Trapping characteristic time of free electrons	s
τ_p	Trapping characteristic time of free holes	s
τ_{n_t}	De-trapping characteristic time of trapped electrons	s
τ_{p_t}	De-trapping characteristic time of trapped holes	s
μ_n	Mobility coefficient of free electrons	$\text{m}^2.\text{V}^{-1}.\text{s}^{-1}$
μ_p	Mobility coefficient of free holes	$\text{m}^2.\text{V}^{-1}.\text{s}^{-1}$
D_n	Diffusion coefficient of free electrons	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
D_p	Diffusion coefficient of free holes	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
α_{np}	Recombination coefficient between free electrons and free holes	$\text{m}^3.\text{s}^{-1}$
α_{pn_t}	Recombination coefficient between free holes and trapped electrons	$\text{m}^3.\text{s}^{-1}$
α_{np_t}	Recombination coefficient between free electrons and trapped holes	$\text{m}^3.\text{s}^{-1}$
r_0	Initial separation distance between an electron and its parent atom [19]	m
φ_0	Efficiency of production of thermalized ion pairs per absorbed electron [19]	NO UNIT
β	Coefficient related to the decrease of the Coulomb barrier under the influence of an electric field [89]	$\text{m}^{1/2}.\text{V}^{-1/2}$
E_g	Gap energy between a deep trap and the conduction band	eV

Table 3. THEMIS input parameters.

Symbol	Designation	Unit (SI)
k_p	RIC coefficient	$\Omega^{-1}.\text{m}^{-1}.\text{(Gy}^{-1}.\text{s)}^\Delta$
σ_{DC}	Dark conductivity	$\Omega^{-1}.\text{m}^{-1}$
Δ	Exponent for the dose rate in the RIC calculation	NO UNIT
E_A	Activation energy	eV

Table 4. MCICT input parameters.

The MCICT numerical tool

Bibliographie

- [1] R. Hanna *et al.*, « Radiation induced conductivity in space dielectric materials », *Journal of Applied Physics*, vol. 115, n° 3, p. 033713, janv. 2014.
- [2] « P. Lantos. "The sun, the solar wind and their effects on the earth's environment". In : Cours de technologie spatiale : "Environnement spatial : Prévention des risques liés aux phénomènes de charge." Cépaduès-Éditions, 2002, p. 37. », .
- [3] J. A. Van Allen, C. E. McIlwain, et G. H. Ludwig, « Radiation observations with satellite 1958 ε », *Journal of Geophysical Research*, vol. 64, n° 3, p. 271-286, mars 1959.
- [4] S. A. Bourdarie et V. F. Maget, « Electron radiation belt data assimilation with an ensemble Kalman filter relying on the Salammbô code », *Annales Geophysicae*, vol. 30, n° 6, p. 929-943, juin 2012.
- [5] Q. Nénon, A. Sicard, P. Kollmann, H. B. Garrett, S. P. A. Sauer, et C. Paranicas, « A Physical Model of the Proton Radiation Belts of Jupiter inside Europa's Orbit », *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, mai 2018.
- [6] « A. Roggero, thèse soutenue en 2015 - "Analyse du vieillissement d'un adhésif silicone en environnement spatial : influence sur le comportement électrique" ; école doctorale ED SDM ; laboratoire de recherche ONERA ». .
- [7] « <http://spaceflight.nasa.gov/gallery/images/shuttle/sts-114/html/s114e6647.html> ». .
- [8] « <https://microscope.onera.fr/publications> ». .
- [9] O. Jorba Ferro, S. Hess, E. Seran, C. Bastien-Thiry, et D. Payan, « Coupled Fluid-Kinetic Numerical Method to Model Spacecraft Charging in LEO », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 46, n° 3, p. 651-658, mars 2018.
- [10] H. B. Garrett, « The charging of spacecraft surfaces », *Reviews of Geophysics*, vol. 19, n° 4, p. 577, 1981.
- [11] A. Brunet, « Méthode Multi-Échelle pour la Modélisation de l'Effet d'un Générateur Solaire sur la Charge Électrostatique d'un Satellite », p. 154.
- [12] R. Hanna *et al.*, « Radiation Induced Conductivity in Teflon FEP Irradiated With Multienergetic Electron Beam », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 41, n° 12, p. 3520-3525, déc. 2013.
- [13] « I. Katz, V. A. Davis, D. B. Snyder et E. A. Robertson. "ESD triggered solar array failure mechanism". In : 6th Spacecraft Charging Technology. 1998, p. 39-42. ». .
- [14] I. Katz, V. Davis, et D. Snyder, « Mechanism for spacecraft charging initiated destruction of solar arrays in GEO », 1998.
- [15] E. Y. Choueiri, A. J. Kelly, et R. G. Jahn, « Mass savings domain of plasma propulsion for LEO to GEO transfer », *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 30, n° 6, p. 749-754, nov. 1993.
- [16] J. J. Likar, A. Bogorad, K. A. August, R. E. Lombardi, K. Kannenberg, et R. Herschitz, « Spacecraft Charging, Plume Interactions, and Space Radiation Design Considerations for All-Electric GEO Satellite Missions », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 43, n° 9, p. 3099-3108, sept. 2015.
- [17] *Spacecraft Plasma Interaction Software (SPIS)* : <http://dev.spis.org/projects/spine/home/spis>. .
- [18] D. A. McPherson, D. P. Cauffman, et W. R. Schober, « Spacecraft Charging at High Altitudes: SCATHA Satellite Program », *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 12, n° 10, p. 621-626, oct. 1975.
- [19] « J.-C. Mateo-Velez, M. Belhaj, S. Dadouch, P. Sarrailh, S. L. G. Hess et D. Payan, "Worst-case surface charging: On the importance of measuring the electron emission yield under representative environmental conditions", Spacecraft Charging Technology Conference, Proceedings of the Fifteenth International Conference held 25-29 June, 2018 at Kobe University, Japan ». .

- [20] « D. J. Rodgers et K. A. Ryden, “Internal Charging in Space”, Spacecraft Charging Technology, Proceedings of the Seventh International Conference held 23-27 April, 2001 at ESTEC, Noordwijk, the Netherlands ». .
- [21] G. M. Sessler, B. Hahn, et D. Y. Yoon, « Electrical conduction in polyimide films », *Journal of Applied Physics*, vol. 60, n° 1, p. 318-326, juill. 1986.
- [22] *Spacecraft Plasma Interaction Software - Internal Charging (SPIS-IC)* : <http://dev.spis.org/projects/spine/home/spisic>. .
- [23] « P. Sarrailh, R. Pacaud, T. Paulmier, S. Hess et D. Payan, “Simulation of the effect of time-dependent electron environment on the internal charging dynamic using SPIS-IC”, Spacecraft Charging Technology Conference, Proceedings of the Fifteenth International Conference held 25-29 June, 2018 at Kobe University, Japan ».
- [24] R. Pethig, « Holes in the energy-band theory? », *Students Quarterly Journal*, vol. 36, n° 143, p. 133, 1966.
- [25] Y. Ohki, N. Fuse, et T. Arai, « Band gap energies and localized states in several insulating polymers estimated by optical measurements », 2010, p. 1-4.
- [26] A. Palov, H. Fujii, et S. Hiro, « Monte Carlo Simulation of 1 eV–35 keV Electron Scattering in Teflon », *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 37, n° Part 1, No. 11, p. 6170-6176, nov. 1998.
- [27] L. Onsager, « Initial Recombination of Ions », *Physical Review*, vol. 54, n° 8, p. 554-557, oct. 1938.
- [28] J. Boch, F. Saigne, L. Dusseau, et R. D. Schrimpf, « Temperature effect on geminate recombination », *Applied Physics Letters*, vol. 89, n° 4, p. 042108, juill. 2006.
- [29] « Programme de simulation de Monte-Carlo : Casino, développé par Drouin D, Hovington P et Gauvin R. Plus d'informations sur le programme peuvent être obtenues à l'adresse suivante : www.gel.usherbrooke.ca/casino/ ». .
- [30] M. A. Lieberman et A. J. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing: Lieberman/Plasma 2e*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2005.
- [31] « R. Hanna, thèse soutenue en 2012 - “Transport de charges et mécanismes de relaxation dans les matériaux diélectriques à usage spatial” ; école doctorale GEET ; laboratoire de recherche ONERA ». .
- [32] G. M. Sessler et M. G. Broadhurst, Éd., *Electrets*, 3rd ed. Morgan Hill, CA: Laplacian Press, 1998.
- [33] A. R. Blythe et D. Bloor, *Electrical properties of polymers*, 2nd ed., New ed., fully rev. and expanded. Cambridge ; New York: Cambridge University Press, 2005.
- [34] P. W. Anderson, « Absence of Diffusion in Certain Random Lattices », *Physical Review*, vol. 109, n° 5, p. 1492-1505, mars 1958.
- [35] J. Frenkel, « On Pre-Breakdown Phenomena in Insulators and Electronic Semi-Conductors », *Physical Review*, vol. 54, n° 8, p. 647-648, oct. 1938.
- [36] J. G. Simmons, « Conduction in thin dielectric films », *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 4, n° 5, p. 613-657, mai 1971.
- [37] P. Molinie *et al.*, « Polyimide and FEP charging behavior under multienergetic electron-beam irradiation », *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, vol. 19, n° 4, p. 1215-1220, août 2012.
- [38] M. Arnaout, T. Paulmier, B. Dirassen, et D. Payan, « Non-contact in-situ pulsed electro acoustic method for the analysis of charge transport in irradiated space-used polymers », *Journal of Electrostatics*, vol. 77, p. 123-129, oct. 2015.
- [39] C. Perrin, V. Griseri, et C. Laurent, « Measurement of internal charge distribution in dielectrics using the pulsed electro-acoustic method in non contact mode », *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, vol. 15, n° 4, p. 958-964, août 2008.
- [40] T. Paulmier, B. Dirassen, M. Arnaout, D. Payan, et N. Balcon, « Radiation-Induced Conductivity of Space Used Polymers Under High Energy Electron Irradiation », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 43, n° 9, p. 2907-2914, sept. 2015.

- [41] G. Teyssedre et C. Laurent, « Charge transport modeling in insulating polymers: from molecular to macroscopic scale », *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, vol. 12, n° 5, p. 857-875, oct. 2005.
- [42] G. Santin, V. Ivanchenko, H. Evans, P. Nieminen, et E. Daly, « GRAS: a general-purpose 3-D Modular Simulation tool for space environment effects analysis », *IEEE Transactions on Nuclear Science*, vol. 52, n° 6, p. 2294-2299, déc. 2005.
- [43] H. Demers *et al.*, « Three-dimensional electron microscopy simulation with the CASINO Monte Carlo software », *Scanning*, vol. 33, n° 3, p. 135-146, mai 2011.
- [44] S. Morato, R. Miro, B. Juste, G. Verdu, et A. Santos, « Monte Carlo dose estimation in patient-specific volume mesh from CT images », 2016, p. 1590-1594.
- [45] J. C. Butcher et H. Messel, « Electron number distribution in electron-photon showers in air and aluminium absorbers », *Nuclear Physics*, vol. 20, p. 15-128, oct. 1960.
- [46] K.-H. Weber, « Eine einfache reichweite-energie-beziehung für elektronen im energiebereich von 3 keV bis 3 MeV », *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 25, p. 261-264, déc. 1963.
- [47] E. J. Kobetich et R. Katz, « Electron energy dissipation », *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 71, n° 2, p. 226-230, juin 1969.
- [48] « Lima. W and Poly. CR. D, “Generalized empirical equation for the extrapolated range of electrons in elemental and compound materials”, International Atomic Energy Agency, Vienna (Austria); 359 p; ISSN 1011-4289; Worldcat; Mar 1999; p. 249-256; Symposium on techniques for high dose dosimetry in industry, agriculture and medicine; Vienna (Austria); 2-5 Nov 1998 ». .
- [49] L. Katz et A. S. Penfold, « Range-Energy Relations for Electrons and the Determination of Beta-Ray End-Point Energies by Absorption », *Reviews of Modern Physics*, vol. 24, n° 1, p. 28-44, janv. 1952.
- [50] R. C. Murty, « Effective Atomic Numbers of Heterogeneous Materials », *Nature*, vol. 207, n° 4995, p. 398-399, juill. 1965.
- [51] B. N. Subba Rao, « A simple formula for the transmission and absorption of monoenergetic electrons », *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 44, n° 1, p. 155-156, sept. 1966.
- [52] T. Tabata et R. Ito, « A generalized empirical equation for the transmission coefficient of electrons », *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 127, n° 3, p. 429-434, août 1975.
- [53] J. F. Fowler, « X-Ray Induced Conductivity in Insulating Materials », *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 236, n° 1207, p. 464-480, sept. 1956.
- [54] G. M. Sessler, M. T. Figueiredo, et G. F. Leal Ferreira, « Models of charge transport in electron-beam irradiated insulators », *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, vol. 11, n° 2, p. 192-202, avr. 2004.
- [55] L. W. Parker et A. Meulenberg, « Theory of Radiation-Induced and Carrier-Enhanced Conductivity: Space Charge and Contact Effects », *IEEE Transactions on Nuclear Science*, vol. 31, n° 6, p. 1368-1374, déc. 1984.
- [56] O. B. Evdokimov et Y. A. Solovyov, « Space-charge storage in polymer dielectrics irradiated with fast electrons », *Radiation Physics and Chemistry (1977)*, vol. 23, n° 3, p. 341-347, janv. 1984.
- [57] J. C. Gillespie, « Measurement of The Temperature Dependence of Radiation Induced Conductivity in Polymeric Dielectrics », p. 179, 2013.
- [58] B. Gross, R. M. Faria, et G. F. L. Ferreira, « Radiation-induced conductivity in Teflon irradiated by x rays », *Journal of Applied Physics*, vol. 52, n° 2, p. 571-577, févr. 1981.
- [59] T. Paulmier, B. Dirassen, et R. Rey, « Experimental Characterization of Internal Charging Processes in MEO-Like Electron Environment », *IEEE Transactions on Plasma Science*, p. 1-6, 2018.

- [60] T. Paulmier, B. Dirassen, et R. Rey, « Electrostatic behaviour of space used materials in regard of internal charging met on spacecrafts », *Journal of Electrostatics*, vol. 92, p. 66-74, avr. 2018.
- [61] D. J. Rodgers, K. A. Ryden, G. L. Wrenn, P. M. Latham, J. Sørensen, et L. Levy, « An Engineering Tool for the Prediction of Internal Dielectric Charging », p. 7.
- [62] F. Lei, D. Rodgers, et P. Truscott, « MCICT - MONTE-CARLO INTERNAL CHARGING TOOL », p. 6, 2016.
- [63] Insoo Jun, H. B. Garrett, Wousik Kim, et J. I. Minow, « Review of an Internal Charging Code, NUMIT », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 36, n° 5, p. 2467-2472, oct. 2008.
- [64] R. C. Hughes et R. J. Sokel, « Computation of photoconductivity in insulators in the space charge and recombination regime: Application to PbO films », *Journal of Applied Physics*, vol. 52, n° 11, p. 6743-6748, nov. 1981.
- [65] D. M. Pai et R. C. Enck, « Onsager mechanism of photogeneration in amorphous selenium », *Physical Review B*, vol. 11, n° 12, p. 5163-5174, juin 1975.
- [66] A. Tyutnev, V. Saenko, et E. Pozhidaev, « Frequency Factor of the Semiempirical Model for the Radiation-Induced Conductivity in Spacecraft Polymers », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 46, n° 3, p. 645-650, mars 2018.
- [67] A. Tyutnev, V. Saenko, E. Pozhidaev, et R. Ikhsanov, « Experimental and Theoretical Studies of Radiation-Induced Conductivity in Spacecraft Polymers », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 43, n° 9, p. 2915-2924, sept. 2015.
- [68] M. Ieda, G. Sawa, et S. Kato, « A Consideration of Poole-Frenkel Effect on Electric Conduction in Insulators », *Journal of Applied Physics*, vol. 42, n° 10, p. 3737-3740, sept. 1971.
- [69] J. L. Hartke, « The Three-Dimensional Poole-Frenkel Effect », *Journal of Applied Physics*, vol. 39, n° 10, p. 4871-4873, sept. 1968.
- [70] P. A. Martin, B. G. Streetman, et K. Hess, « Electric field enhanced emission from non-Coulombic traps in semiconductors », *Journal of Applied Physics*, vol. 52, n° 12, p. 7409-7415, déc. 1981.
- [71] H. Wich, « N. F. Mott. Metal-insulator transitions. Taylor & Francis Ltd., London 1974 XVI, 278 Seiten, 158 Figuren. Preis geb. \$ 6.50 », *Kristall und Technik*, vol. 10, n° 4, p. K57-K58, 1975.
- [72] B. Gross, G. M. Sessler, et J. E. West, « Charge dynamics for electron-irradiated polymer-foil electrets », *Journal of Applied Physics*, vol. 45, n° 7, p. 2841-2851, juill. 1974.
- [73] V. Adamec et J. H. Calderwood, « Electrical conduction in dielectrics at high fields », *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 8, n° 5, p. 551-560, avr. 1975.
- [74] S. L. Roy, P. Segur, G. Teyssedre, et C. Laurent, « Description of bipolar charge transport in polyethylene using a fluid model with a constant mobility: model prediction », *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 37, n° 2, p. 298-305, janv. 2004.
- [75] « V. Volterra, « Fluctuations in the abundance of a species considered mathematically », *Nature*, no 118, 1926, p. 558-60 ».
- [76] T. Paulmier, B. Dirassen, M. Belhaj, V. Inguibert, D. Payan, et N. Balcon, « Experimental test facilities for representative characterization of space used materials », p. 7, 2014.
- [77] H. J. Wintle, « Hole schubweg in FEP (fluorinated ethylene propylene copolymer) », *International Journal of Radiation Applications and Instrumentation. Part C. Radiation Physics and Chemistry*, vol. 28, n° 3, p. 315-317, janv. 1986.
- [78] H. Seggern, B. Gross, et D. A. Berkley, « Constant hole schubweg in Teflon FEP (fluorinated ethylene propylene copolymer) », *Applied Physics A Solids and Surfaces*, vol. 34, n° 3, p. 163-166, juill. 1984.
- [79] G. M. Sessler et G. M. Yang, « Charge transport in Teflon and Kapton », 1995, p. 630-633.

- [80] T. Paulmier, B. Dirassen, D. Payan, et M. Arnaout, « Analysis of Charge Transport and Ionization Effect in Space-Used Polymers Under High-Energy Electron Irradiation », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 45, n° 8, p. 1933-1937, août 2017.
- [81] « R. Pacaud, et al « Study of internal charging of four commonly used polymers through experimental and numerical analysis », *J. Appl. Phys.*, vol. -, no -, p. -, month. year. »
- [82] P. Sarrailh *et al.*, « Validation Through Experiments of a 3-D Time-Dependent Model of Internal Charging », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 45, n° 9, p. 2566-2572, sept. 2017.
- [83] R. Pacaud, T. Paulmier, et P. Sarrailh, « 1-D Physical Model of Charge Distribution and Transport in Dielectric Materials Under Space Radiations », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 45, n° 8, p. 1947-1954, août 2017.
- [84] K. A. Ryden, A. D. P. Hands, C. I. Underwood, et D. J. Rodgers, « Internal Charging Measurements in Medium Earth Orbit Using the SURF Sensor: 2005–2014 », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 43, n° 9, p. 3014-3020, sept. 2015.
- [85] A. Hands et K. Ryden, « Experimental Measurement of Low-Intensity and Long-Duration Internal Charging Behavior », *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 45, n° 8, p. 1938-1946, août 2017.
- [86] J.-C. Matéo-Vélez, A. Sicard, D. Payan, N. Ganushkina, N. P. Meredith, et I. Sillanpää, « Spacecraft surface charging induced by severe environments at geosynchronous orbit », *Space Weather*, vol. 16, n° 1, p. 89-106, janv. 2018.
- [87] V. Adamec et J. H. Calderwood, « Electrical conduction in dielectrics at high fields », *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 8, n° 5, p. 551-560, avr. 1975.
- [88] R. Pacaud, T. Paulmier, et P. Sarrailh, « Electric field dependence on the conductivity of Kapton-HN: Integration into a 1D physical model used for the description of charge transport in dielectric materials under space environment », *Journal of Applied Physics*, vol. 122, n° 24, p. 245106, déc. 2017.
- [89] S. D. Ganichev, E. Ziemann, W. Prettl, I. N. Yassievich, A. A. Istratov, et E. R. Weber, « Distinction between the Poole-Frenkel and tunneling models of electric-field-stimulated carrier emission from deep levels in semiconductors », *Physical Review B*, vol. 61, n° 15, p. 10361-10365, avr. 2000.
- [90] R. B. Horne et D. Pitchford, « Space Weather Concerns for All-Electric Propulsion Satellites: ALL-ELECTRIC PROPULSION », *Space Weather*, vol. 13, n° 8, p. 430-433, août 2015.