

Université de Neuchâtel

Etude expérimentale de l'atome
d'hydrogène pionique
par spectrométrie de rayons X

Mesure de précision des effets de l'interaction forte
dans la transition 3P-1S à l'aide d'un spectromètre
à cristaux de silicium incurvés

Thèse

présentée à la Faculté des Sciences de l'Université de Neuchâtel
en présence du jury composé de
Messieurs E. Bovet, J.-L. Vuilleumier,
J.-P. Egger et H.-J. Leisi (EPF-Zürich)
pour l'obtention du grade de Docteur ès Sciences

par

Gianni Fiorucci

Physicien diplômé de l'Université de Neuchâtel

Institut de Physique
Breguet 1, CH-2000 Neuchâtel
Suisse

1990

IMPRIMATUR POUR LA THÈSE

Etude expérimentale de l'atome d'hydrogène
pionique par spectrométrie de rayons X

démonsieur Gianni Fiorucci

UNIVERSITÉ DE NEUCHÂTEL

FACULTÉ DES SCIENCES

La Faculté des sciences de l'Université de Neuchâtel
sur le rapport des membres du jury,

Messieurs E. Bövet, J.-L. Vuilleumier,
J.-P. Egger et H.-J. Leise (EPF-Zurich)

autorise l'impression de la présente thèse.

Neuchâtel, le 7 février 1991

Le doyen:

C1. Mermoud

Table des matières

I	Introduction et buts	1
I.1	Résumé	1
I.2	Motivation	2
I.3	Connexion avec QCD	5
I.3.1	Longueurs de diffusion	5
I.3.2	QCD et symétrie chirale	9
I.3.3	Terme σ et longueurs de diffusion	9
I.3.4	Relations avec l'atome π^-H	12
I.4	Physique de l'atome π^-H	16
I.4.1	Formation et cascade	16
I.4.2	Calcul des niveaux de π^-H	20
I.4.3	Correction des niveaux coulombiens de π^-H	22
I.4.4	Transitions K_α et K_β de π^-H	29
I.4.5	Effets perturbateurs	30
I.5	Choix d'un système de mesure	35
II	Spectromètre à cristaux de silicium	37
II.1	Résumé	37
II.2	Choix du cristal: quartz ou silicium?	38
II.3	Diffraction de Bragg sur un réseau cristallin	39
II.3.1	Loi de Bragg	39
II.3.2	Intensité diffractée	40
II.3.3	Facteur de phases	42
II.3.4	Facteur de structure	43
II.3.5	Facteur de diffusion atomique	43
II.3.6	Théorie de Darwin-Prins	45
II.3.7	Extinction primaire et extinction secondaire	48
II.3.8	Influence de la température	49
II.3.9	Détermination des caractéristiques pour Si(111)	50
II.3.10	Tableau-résumé des caractéristiques pour Si(111)	55
II.4	Géométrie du spectromètre	56
II.4.1	Focalisation des rayons X	57
II.4.2	Calcul des aberrations géométriques	60
II.4.3	Conception finale du spectromètre	75
II.5	Technique de courbage des cristaux	78
II.5.1	Méthode générale	78
II.5.2	Soudage anodique (Anodic Bonding)	80
II.5.3	Collage sous vide	80
II.6	Tests à 5.9 keV et 2.6 keV	82

III	Système de détection par CCD	85
III.1	Résumé	85
III.2	Description et principe de fonctionnement	86
III.2.1	Caractéristiques générales	87
III.2.2	Détection de rayons X	88
III.2.3	Méthode de lecture	88
III.2.4	Bruit de grenaille (shot noise)	90
III.2.5	Bruit thermique (dark current)	90
III.2.6	Bruit de transfert	91
III.2.7	Bruit électronique	91
III.2.8	Résolution en énergie	91
III.3	Méthode d'analyse et réjection du bruit de fond	93
III.3.1	Topologie des événements	93
III.3.2	Reconstruction des événements dispersés	94
III.3.3	Réjection du bruit de fond	95
III.3.4	Utilisation d'un ordinateur	95
III.4	Tests des CCD à 5.9 keV et 2.6 keV	96
III.4.1	Appareillage	96
III.4.2	Détection de rayons X de 5.9 et 2.6 keV et résolution en énergie	98
III.4.3	Répartition des événements	101
III.4.4	Efficacité	102
III.4.5	Caractéristiques du bruit de fond	104
IV	Mesures et analyses	107
IV.1	Résumé	107
IV.2	Système de mesure et appareillage	108
IV.2.1	Trappe à pions — Cible H_2 — Source Ar de calibration	110
IV.2.2	Assemblage des cristaux et système d'orientation	112
IV.2.3	Système de détection	113
IV.2.4	Méthode de mesure de $\pi^-H(K_\beta)$	116
IV.3	Acquisition des données — Analyses et résultats	119
IV.3.1	Alignement et calibration	119
IV.3.2	Réponse instrumentale	120
IV.3.3	Stabilité mécanique et électronique	122
IV.3.4	Détermination de la longueur d'onde de $\pi^-H(K_\beta)$	123
IV.3.5	Bruit de fond	125
IV.3.6	Détermination du déplacement d'interaction forte ϵ_{1S}	126
IV.3.7	Mesure directe des rayons X émis par la source π^-H	128
V	Synthèse et suggestions	130
V.1	Résumé	130
V.2	Longueur de diffusion πN : nouvelle situation	131
V.2.1	Notre mesure parmi les autres	131

V.2.2	Implications sur le modèle théorique	132
V.2.3	π^- -H(1985) et π^- -H(1990): quelles différences?	132
V.3	Spectromètre: possibilités actuelles et améliorations envisageables . .	133
V.3.1	Réponse instrumentale	133
V.3.2	Cristaux de Si(111)	135
V.3.3	Détecteurs CCD	136
V.4	Conclusion	136
Remerciements		137
En souvenir.....		138
Annexes: publications		144

I Introduction et buts

I.1 Résumé

I.2 Motivation

I.3 Connexion avec QCD

I.4 Physique de l'atome $\pi^- H$

I.5 Choix d'un système de mesure

I.1 Résumé

Ce premier chapitre expose les raisons qui ont motivé notre travail en le situant dans le contexte de la physique nucléaire. Nous établissons ensuite les liens reliant l'aspect théorique (QCD) et l'aspect expérimental sur lequel porte cette thèse.

Les mesures envisagées s'effectuant sur l'hydrogène pionique, il nous a paru nécessaire de passer brièvement en revue les particularités de la physique de cet atome exotique. Finalement, nous présentons les éléments qui ont déterminé le choix de notre système de mesure, un spectromètre à rayons X de basse énergie.

I.2 Motivation

Objet d'étude des physiciens depuis quelques décennies, l'interaction forte demeure encore bien mystérieuse à maints égards, malgré le gigantesque effort expérimental et théorique déployé. Les données expérimentales abondent, mais aucune théorie n'a réussi, à ce jour, à les expliquer de manière globale et cohérente, d'autant plus que l'interprétation des résultats est rendue difficile par la multitude des paramètres entrant en jeu.

Le travail expérimental présenté ici ne prétend pas apporter d'explications supplémentaires. Il fait suite à une série d'expériences dont la première fut réalisée au Los Alamos Meson Physics Facility (LAMPF) par un groupe du California Institute of Technology (CALTECH) (cf. E. Bovet et al., réf. [1]). De retour en Suisse, E. Bovet et le groupe de l'Institut de Physique de l'Université de Neuchâtel l'ont reconduite et ont obtenu en 1984 des résultats incompatibles avec d'autres mesures (voir réf. [2]).

Ce constat d'incompatibilité a motivé notre effort. En axant notre travail sur la réalisation d'une expérience du même type, mais avec un appareillage totalement nouveau, notre but était de contribuer à clarifier la situation ambiguë que l'on rencontrait lorsqu'on comparait entre elles les valeurs expérimentales de certains paramètres fondamentaux. Ceux-ci permettent de lier théorie et expérience dans la tentative d'explication de l'interaction forte. Ces paramètres sont les *longueurs de diffusion pion-nucléon* et ils interviennent dans l'expression des *amplitudes de diffusion* décrivant l'interaction entre hadrons (voir § I.3).

La théorie qui actuellement semble porteuse d'espoir est la *Chromodynamique Quantique* (Quantum Chromodynamics, QCD). Dans le cadre de cette théorie, il est possible de calculer la valeur d'une grandeur (*terme σ*) qui est une mesure de la brisure de la *symétrie chirale*. Ce terme σ peut être relié aux longueurs de diffusion pion-nucléon et on dispose ainsi d'un moyen de vérifier par l'expérience la validité de certaines prédictions de QCD. Les termes utilisés dans cette introduction seront définis ultérieurement (§ I.3).

Deux types d'expériences sont envisageables pour déterminer les valeurs des longueurs de diffusion. Dans les deux cas on cherche à étudier les systèmes hadroniques les plus simples possibles. Parmi ceux-ci, le système pionique π^-p est un bon candidat.

Le premier type d'expériences fait appel à la méthode classique de diffusion qui consiste à envoyer un projectile — π^+ ou π^- dans ce cas — sur la cible que constitue le proton. On mesure ensuite la distribution spatiale — section efficace différentielle — des pions diffusés. Cette distribution dépend de l'interaction entre $\pi^\pm$ et le proton que l'on décrit au moyen d'une *amplitude de diffusion*. Une analyse en ondes partielles permet ensuite de déterminer les longueurs de diffusion d'onde S par extrapolation à énergie nulle. La difficulté de cette démarche réside d'une part dans le problème technique que pose la mesure précise de la diffusion $\pi^\pm p$ à très

basse énergie et, d'autre part, dans la normalisation correcte des sections efficaces mesurées.

Le second type d'expériences se réalise plutôt dans le cadre de la physique atomique et présente l'avantage de s'effectuer à énergie quasi-nulle. On utilise le fait que l'interaction forte modifie, dans l'atome π^-H , les niveaux d'énergie fixés par l'interaction de Coulomb (équation de Klein-Gordon).

Bien que n'existant pas à l'état libre dans la nature à cause de la durée de vie réduite du π^- , on peut facilement créer cet atome exotique au moyen d'accélérateurs de particules capables de produire des faisceaux intenses de mésons π^- , comme on le fait par exemple avec le synchro-cyclotron du PSI (Paul Scherrer Institut) à Villigen.

L'interaction hadronique se manifeste par un déplacement et un élargissement de certains niveaux qui, comme nous le verrons ci-dessous, peuvent être reliés aux longueurs de diffusion pion-nucléon. Par une mesure précise de certaines transitions radiatives il est possible d'en déduire les valeurs des longueurs de diffusion caractéristiques de l'interaction forte.

Cette seconde démarche nous a séduit par le nombre restreint de paramètres à déterminer (deux au total: déplacement et élargissement) et par la taille raisonnable de l'expérience qu'elle implique, la mettant à la portée d'un petit groupe (moins de 10 collaborateurs) tel que le nôtre.

Nous montrerons plus loin que les transitions atomiques concernées donnent naissance à des rayons X de basse énergie (2 à 3 keV) et que la mesure de l'élargissement des niveaux requiert une grande précision (≤ 1 eV). L'instrument adapté à de telles mesures — un spectromètre à haute résolution — a entièrement été conçu et réalisé par notre équipe. Il constitue, avec la mesure des longueurs de diffusion précitées, l'objet principal du présent travail.

Avant d'aborder le résumé de la partie théorique du problème, nous décrivons la situation actuelle dans la connaissance des longueurs de diffusion pion-nucléon, situation qui a motivé notre effort expérimental. Notre description se réfère à la figure 1 où l'on a reporté en abscisse la combinaison $(2a_1 + a_3)$ et en ordonnée la combinaison $(a_1 - a_3)$ des longueurs de diffusion d'onde S a_1 (isospin $\frac{1}{2}$) et a_3 (isospin $\frac{3}{2}$). L'unité utilisée est l'inverse de la masse pionique (m_π^{-1}) et on a la correspondance $1 m_\pi^{-1} = 1.414 fm$.

Une précédente expérience (réf. [2]), du même type que celle présentée ici, avait permis d'obtenir la valeur $(2a_1 + a_3) = 0.178 \pm 0.019 m_\pi^{-1}$, mais n'a pas donné celle de $(a_1 - a_3)$. Seule l'abscisse a donc pu être fixée.

L'analyse en phases de la diffusion $\pi^\pm p$ (réf. [3]) permet d'obtenir, de façon indirecte, les longueurs de diffusion a_1 et a_3 . On constate sur la figure 1 que les valeurs de $(2a_1 + a_3)$ obtenues par ces deux méthodes diffèrent de 3 déviations standard.

La valeur de la combinaison $(a_1 - a_3)$ a été déterminée de diverses manières:

- déduction à partir du rapport de Panofsky (réf. [4]);
- analyse des mesures d'échange de charge (réf. [5]);
- relations de dispersion (réf. [6]).

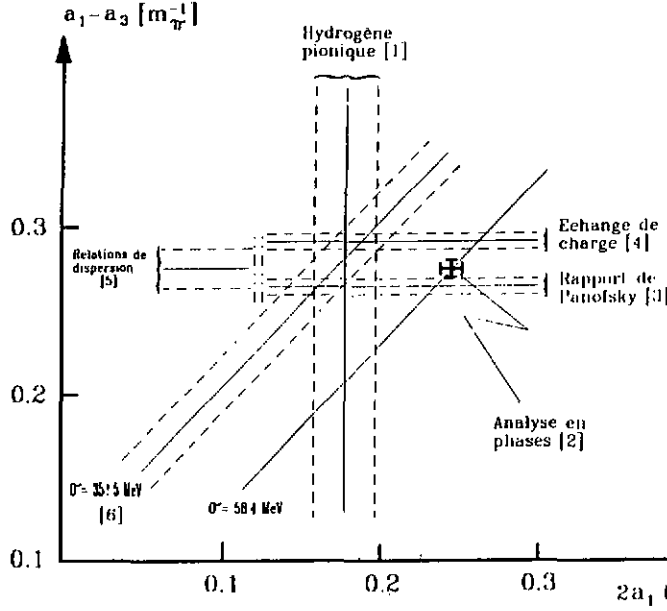


Figure 1: *Etat de la connaissance des longueurs de diffusion pion-nucléon avant notre expérience.*

On voit que [4] diffère de [5] de 5 déviations standard et que [6], avec de grandes barres d'erreur, est compatible avec les deux valeurs précédentes.

D'autre part, la théorie chirale de QCD prédit un terme σ de $35 \pm 5 \text{ MeV}$ (réf. [7]) qui correspond à la droite oblique représentée sur la figure 1. Mais avec l'analyse en phases (réf. [3]) on obtient $\sigma = 58.4 \pm 3.4 \text{ MeV}$, qui diffère notablement de la valeur précédente.

On constate donc une bonne concordance entre la valeur théorique du terme σ (réf. [7]), les résultats provenant de l'hydrogène pionique (réf. [2]) et les valeurs de $(a_1 - a_3)$. Mais une expérience récente (cf. réf. [8]) vient confirmer la valeur issue de l'analyse en phases, assignant ainsi au terme σ une valeur d'environ 60 MeV , en contradiction avec la théorie.

Cette situation, pour le moins confuse, nécessite donc une clarification qu'une mesure précise des combinaisons $(2a_1 + a_3)$ et $(a_1 - a_3)$ peut apporter. L'instrument envisagé devrait en permettre une nouvelle détermination par la mesure du déplacement et de l'élargissement d'interaction forte du niveau $1S$ de l'hydrogène pionique.

La partie théorique de notre problème est présentée de manière succincte dans les sections I.2 et I.3. Un bref rappel des éléments fondamentaux permettra d'établir le lien entre théorie et expérience dans le cadre de ce travail qui porte essentiellement sur l'aspect expérimental.

Le lecteur désirant approfondir des sujets théoriques particuliers pourra se référer à la bibliographie citée.

I.3 Connexion avec QCD

I.3.1 Longueurs de diffusion

Constatant que les forces nucléaires sont à un bon degré d'approximation indépendantes de la charge, il a été introduit le *formalisme d'isospin* pour décrire l'interaction forte (voir réfs [9], [10] et [11], ainsi que la bibliographie citée dans celles-ci).

Ce formalisme, analogue à celui décrivant le spin, permet de grouper en familles les particules présentant un comportement semblable sous l'effet de l'interaction forte. On appelle ces familles des *multiplets d'isospin*. Ainsi, le proton et le neutron sont les composantes — deux réalisations d'un même état — d'un doublet d'isospin $I = \frac{1}{2}$: le nucléon; les π^+ , π^- et π^0 forment eux un triplet d'isospin $I = 1$: le pion.

Les particules sont donc représentées par des *états d'isospin*. Sur ces états opèrent des *transformations d'isospin* qui permettent, par exemple, de transformer un proton en un neutron et vice-versa. Il apparaît que les forces nucléaires sont, avec une bonne approximation, invariantes sous les transformations d'isospin et que la violation de cette symétrie est principalement due aux forces électromagnétiques.

A partir du formalisme d'isospin, l'interaction entre hadrons est décrite en couplant des états d'isospin par des opérateurs représentant cette interaction. Dans notre cas, on s'intéresse à la *diffusion élastique pion-nucléon*: $\pi + N \longrightarrow \pi + N$. On calcule ainsi une *amplitude de diffusion* dont le module au carré correspond à la *section efficace différentielle*:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}', \vec{k})|^2 . \quad (1)$$

Cette grandeur, caractéristique de l'interaction, permet de calculer le nombre de particules $N(\theta)$ détectées sous l'angle θ , par un détecteur d'angle solide $\Delta\Omega$:

$$N(\theta) = N_0 \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot n \cdot \Delta\Omega \quad (2)$$

où: N_0 est le nombre de particules incidentes, et n le nombre de particules par unité de surface de la cible.

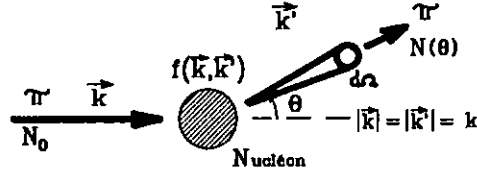


Figure 2: Diffusion élastique pion-nucléon. L'amplitude $f(\vec{k}', \vec{k})$ décrit l'interaction π - N .

L'invariance sous le groupe des rotations permet d'écrire l'amplitude de diffusion sous forme d'un développement en polynômes de Legendre (cf. réf. [9]):

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f(E, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot f_l(E) \cdot P_l(\cos\theta) \quad (3)$$

où: θ = angle azimuthal d'observation;

l = nombre quantique relatif au moment angulaire orbital;

$P_l(\cos\theta)$ = polynôme de Legendre d'indice l ;

$f_l(E)$ = amplitude de diffusion πN partielle relative au moment orbital l .

Ce développement est appelé *développement en ondes partielles* car il fait apparaître séparément la contribution à l'amplitude totale des ondes S ($l=0$), P ($l=1$), etc... L'expression (3) ne tient pas compte du spin du nucléon. Il faut donc la modifier pour y inclure le couplage du moment orbital avec le spin ($l \pm \frac{1}{2}$). On obtient alors la relation

$$f(E, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ l f_{l-} + (l+1) f_{l+} \right\} \cdot P_l(\cos\theta) - i \vec{\sigma} \cdot \hat{k}' \wedge \hat{k} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ f_{l+} - f_{l-} \right\} \cdot \frac{dP_l(\cos\theta)}{d\cos\theta} \quad (4)$$

où: $f_{l\pm}$ = amplitudes de diffusion partielles correspondant au moment orbital l et au couplage ($l + \frac{1}{2}$) pour l_+ et ($l - \frac{1}{2}$) pour l_- ;

$\vec{\sigma}$ = vecteur formé par les matrices de Pauli;

$\hat{k}'$ et $\hat{k} = \frac{\vec{k}'}{|\vec{k}'|}$ et $\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$.

On peut montrer (cf. réf. [9]) que les amplitudes partielles $f_{l\pm}$ peuvent s'exprimer à l'aide de *phases de diffusion* $\delta_{l\pm}$:

$$f_{l\pm}(k) = \frac{1}{2ik} \cdot (e^{2i\delta_{l\pm}(k)} - 1). \quad (5)$$

Dans le cas où la diffusion s'effectue de manière élastique, les phases $\delta_{l\pm}$ sont purement réelles et on a

$$f_{l\pm}(k) = \frac{1}{k} \cdot e^{i\delta_{l\pm}(k)} \cdot \sin \delta_{l\pm}(k). \quad (6)$$

Lorsqu'on considère l'interaction pion-nucléon à basse énergie, il suffit de limiter le développement (4) aux ondes S et P ($l = 0$ et $l = 1$), les contributions des l supérieurs devenant négligeables. On obtient alors pour l'amplitude de diffusion

$$f(E, \theta) \cong f_{0+}(E) + \{f_{1-} + 2f_{1+}\} \cos \theta + i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \{f_{1-} - f_{1+}\} \sin \theta, \quad (7)$$

avec $\vec{n} = \frac{\vec{k}' \wedge \vec{k}}{|\vec{k}' \wedge \vec{k}|}$, vecteur normal au plan de diffusion.

Au voisinage du seuil ($E \approx 0$), on peut remplacer les amplitudes d'ondes partielles ($f_{l\pm}$) par leur expressions limites valables à énergie nulle. On peut montrer (réf. [9]) que ces *amplitudes de diffusion à énergie nulle*, notées $a_{l\pm}$, sont données par

$$a_{l\pm} = \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{f_{l\pm}(k)}{k^{2l}} \right) = \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{\delta_{l\pm}(k)}{k^{2l+1}} \right). \quad (8)$$

Les dimensions de $a_{l\pm}$ sont des $[longueur]^{2l+1}$. Nous avons donc une *longueur* pour $l = 0$ (onde S) et un *volume* pour $l = 1$ (onde P). La relation (8) définit donc

- la longueur de diffusion d'onde S : $a_{0\pm}$

ainsi que

- le volume de diffusion d'onde P : $a_{1\pm}$.

Lorsqu'on étudie le système πN à basse énergie, on remplace généralement les amplitudes de diffusion par leur limite à énergie nulle, mais en y incluant des indices d'isospin, indices que nous avons négligés jusqu'ici. Ainsi, on utilise la notation

$$a_{2I2j}$$

où I est l'isospin total et $j = l_{\pm} = l \pm \frac{1}{2}$ est le moment angulaire total (orbite + spin). Pour l'onde S , on ne note pas l'indice $2j$ qui vaut toujours 1. On a donc a_{2I} et on peut voir (réf. [9]) que seules les amplitudes avec $I = \frac{1}{2}$ ou $I = \frac{3}{2}$ sont possibles dans la diffusion $\pi-N$. Avec $l = 0$ il n'y a donc que deux longueurs de diffusion indépendantes: a_1 (isospin $\frac{1}{2}$) et a_3 (isospin $\frac{3}{2}$). Par contre, les amplitudes mesurables

(a^{π^-p} et a^{π^-n}) s'expriment à l'aide d'une combinaison linéaire des précédentes faisant intervenir les coefficients de Clebsch-Gordan:

$$\begin{aligned} a_{l=0,j=\frac{1}{2}}(\pi^-p) &= a_{0+}(\pi^-p) = \frac{1}{3}(2a_1 + a_3) \\ a_{l=0,j=\frac{1}{2}}(\pi^-n) &= a_{0+}(\pi^-n) = a_3. \end{aligned} \quad (9)$$

De manière semblable on note les volumes de diffusion (onde P) a_{2I2j} et on a:

$$\begin{aligned} a_{l=1,j}(\pi^-p) &= \frac{1}{3}(2a_{12j} + a_{32j}) \\ a_{l=1,j}(\pi^-n) &= a_{32j}. \end{aligned} \quad (10)$$

Ici aussi n'interviennent que les volumes de diffusion a_{12j} (isospin $\frac{1}{2}$) et a_{32j} (isospin $\frac{3}{2}$), l'indice j restant à fixer.

A la limite d'énergie nulle et en tenant compte de l'isospin, l'expression (7) donnant l'amplitude de diffusion totale s'écrit

$$f(E, \theta) \cong b_0 + b_1 \vec{t} \cdot \vec{\tau} + \{c_0 + c_1 \vec{t} \cdot \vec{\tau}\} \vec{k}' \cdot \vec{k} + i \vec{\sigma} \cdot \vec{k}' \wedge \vec{k} \{d_0 + d_1 \vec{t} \cdot \vec{\tau}\} \quad (11)$$

où $\vec{t}$ et $\vec{\tau}$ sont les opérateurs d'isospin du pion et du nucléon respectivement.

La partie ($b_0 + b_1 \vec{t} \cdot \vec{\tau}$) concerne l'onde S et le reste de l'expression décrit l'onde P . Les coefficients b_i , c_i et d_i sont déterminés en évaluant les opérateurs entre des états propres d'isospin total. On obtient ainsi des relations entre ces coefficients et les longueurs et volumes de diffusion vus ci-dessus [(9) et (10)].

• Onde S :

$$\begin{aligned} b_0 &= \frac{1}{3}(a_1 + 2a_3) \\ b_1 &= \frac{1}{3}(a_3 - a_1) \end{aligned} \quad (12)$$

• Onde P :

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{1}{3} \{(a_{11} + 2a_{31}) + 2(a_{13} + 2a_{33})\} \\ c_1 &= \frac{1}{3} \{(a_{31} - a_{11}) + 2(a_{33} - a_{13})\} \\ d_0 &= \frac{1}{3} \{(a_{11} + 2a_{31}) - (a_{13} + 2a_{33})\} \\ d_1 &= \frac{1}{3} \{(a_{31} - a_{11}) - (a_{33} - a_{13})\} \end{aligned} \quad (13)$$

Nous avons ainsi une première liaison entre des paramètres théoriques (longueurs et volumes de diffusion), et une grandeur mesurable expérimentalement: l'amplitude de diffusion $f(E, \theta)$. En réalité, la grandeur qui est mesurée dans les expériences de diffusion est la section efficace différentielle, égale au carré du module de l'amplitude de diffusion:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(E, \theta)|^2.$$

I.3.2 QCD et symétrie chirale

En mécanique relativiste, le spin d'une particule n'est pas une constante du mouvement (ne commute pas avec le hamiltonien). On est ainsi amené à définir une autre grandeur qui, elle, est conservée: l'hélicité $h = \vec{s} \cdot \hat{p}$ qui est la projection du spin $\vec{s}$ sur la direction de propagation (vecteur-impulsion unité $\hat{p}$).

Si en plus on veut décrire simultanément l'état de l'antiparticule, on introduit alors la *chiralité* χ définie par

$$\chi = 2h \text{ pour la particule;}$$

$$\chi = -2h \text{ pour l'antiparticule.}$$

Ainsi, si l'on prend pour exemple le neutrino (hélicité $h = -\frac{1}{2}$) et l'antineutrino ($h = \frac{1}{2}$), ils seront décrit par le même état de chiralité $\chi = -1$.

Dans le cadre de QCD, le formalisme d'isospin s'applique et on définit des transformations d'isospin sous lesquelles l'interaction forte est invariante. Parmi ces transformations, il en existe une catégorie, appelées *transformations chirales*, qui agissent *indépendamment* sur les composantes gauche et droite de la fonction d'onde. Ces composantes sont définies comme étant des *états propres de chiralité*. L'intérêt des transformations chirales réside dans leur propriété de laisser invariantes les équations du mouvement de QCD si les masses des quarks u et d sont nulles. La *symétrie chirale* (invariance sous l'action du groupe des transformations chirales) est donc une symétrie exacte de QCD si $m_u = m_d = 0$. Comme les masses des quarks sont petites (qq. MeV) comparées à celle du nucléon ($\sim 1 \text{ GeV}$), on s'attend à ce que cette symétrie soit une bonne symétrie de QCD.

Des informations plus complètes sur la symétrie chirale peuvent être obtenues en consultant la réf. [10] (pp. 261 et suiv.).

I.3.3 Terme σ et longueurs de diffusion

Puisque la symétrie chirale est exacte à la limite des masses de quarks nulles, il est possible de développer une *théorie chirale perturbative* en fonction de la masse des quarks m_u et m_d (cf. J. Gasser [12]).

La théorie chirale perturbative permet de déterminer quantitativement un paramètre: le *terme σ* pour la diffusion pion-nucléon. Ce terme correspond à une mesure de la brisure de symétrie chirale due à la masse des quarks. Il est donné par la relation

$$\sigma = \frac{m_u + m_d}{4m_p} \langle p | \bar{u}u + \bar{d}d | p \rangle, \text{ en } \text{MeV} \quad (14)$$

où: m_u , m_d et m_p sont les masses des quarks u , d et du proton;

$\bar{u}u$ et $\bar{d}d$ sont des opérateurs relatifs aux quarks u et d ;

$|p\rangle$ est l'état physique d'un proton.

Le calcul de la valeur de σ est basé sur la connaissance (expérimentale) des masses des baryons N , Σ , Ξ et Λ . Le résultat du calcul (voir réfs [12] et [13]) donne

$$\sigma = \frac{35 \pm 5}{1 - y} \text{ MeV},$$

avec

$$y = \frac{2 \langle p | \bar{s}s | p \rangle}{\langle p | \bar{u}u + \bar{d}d | p \rangle}. \quad (15)$$

Ce dernier paramètre donne le contenu relatif de quark étrange s dans le proton. Si on admet, comme on le suppose dans les réfs [12] et [13], que le proton ne contient pas de quark étrange ($y = 0$), alors on obtient théoriquement

$$\sigma = 35 \pm 5 \text{ MeV}. \quad (16)$$

Le terme σ n'est pas directement accessible expérimentalement et sa mise en relation avec les amplitudes de diffusion mesurables requiert une analyse théorique et expérimentale non-triviale. Nous en résumons la démarche, en nous inspirant de l'exposé de J. Gasser (réf. [13]) dont nous reprenons le schéma représenté dans la figure 3 comme guide (voir aussi réf. [14]).

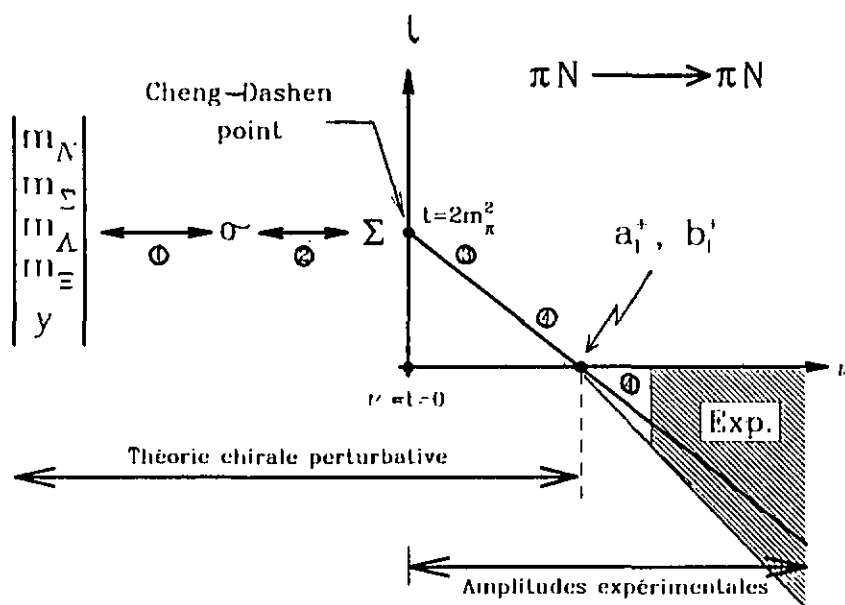


Figure 3: Démarche permettant de relier le terme σ aux amplitudes de diffusion expérimentales (explications dans le texte).

Dans la figure précédente, la partie gauche concerne les étapes théoriques, alors que sur le graphique de droite on trouve une représentation des états de diffusion pion-nucléon en fonction des variables t et $\nu = (s - u)/4m_N$, où s , t et u sont les variables de Mandelstam et m_N est la masse du nucléon. La zone hachurée représente le

domaine accessible expérimentalement et a_t^+ , b_t^+ sont les amplitudes de diffusion à énergie nulle. Les différentes étapes, au nombre de quatre, sont indiquées par des chiffres cerclés.

L'étape 1, théorique, a été décrite au début de ce paragraphe: elle consiste à exprimer le terme σ au moyen des masses des baryons et du paramètre y pour en déduire une valeur théorique (cf. éqs (14), (15) et (16)).

L'étape 2 permet de relier le terme σ à une grandeur Σ par la théorie chirale perturbative. Σ est donné par l'amplitude de diffusion πN d'isospin pair $\bar{D}^+$, évaluée au point Cheng-Dashen ($\nu = \frac{s-u}{4m_N} = 0$, $t = 2m_\pi^2$):

$$\Sigma = F_\pi^2 \cdot \bar{D}^+(\nu = 0, t = 2m_\pi^2), \quad (17)$$

où $F_\pi = 93.3 \text{ MeV}$ est la constante de désintégration du pion.

La relation entre Σ et σ est donnée par la relation (cf. réf. [13])

$$\Sigma = \sigma + \Delta, \quad (18)$$

où Δ représente une somme de corrections dont la valeur, calculée par la théorie chirale, est de 5 MeV (cf. réfs [13] et [14]). Δ englobe plusieurs contributions dont la plus importante ($\sim 3.5 \text{ MeV}$) est due au fait que Σ est évalué à $t = 2m_\pi^2$ et non à $t = 0$. Les diverses contributions à Δ sont décrites dans la réf. [13].

Nous obtenons donc à partir de (18):

$$\sigma = \Sigma - 5 \text{ MeV}. \quad (19)$$

Il suffirait donc de mesurer la valeur de l'amplitude $\bar{D}^+$ au point Cheng-Dashen pour obtenir la relation souhaitée. Mais ce point correspond à un état non-physique, donc inatteignable expérimentalement.

L'étape 3 consiste à exprimer $\bar{D}^+$ au moyen des amplitudes au seuil a_t^+ et b_t^+ qui sont, elles, mesurables. Ce calcul est présenté dans les réfs. [13] et [14] et conduit à la relation suivante pour Σ :

$$\Sigma = \pi F_\pi^2 \left[(4 + 2x + x^2) a_{0+}^+ - 4\mu^2 b_{0+}^+ + 12x\mu^2 a_{1+}^+ \right] + \Sigma_0 \quad (20)$$

où: $x = \frac{m_\pi}{m_N}$ avec m_π la masse du pion et m_N la masse du nucléon;

$a_{0+}^+ = \frac{1}{3}(a_1 + 2a_3)$ est la combinaison isoscalaire des longueurs de diffusion d'onde S (correspond au coefficient b_0 de la relation (11));

a_{1+}^+ est une combinaison des volumes de diffusion d'onde P a_{13} et a_{33} ;

b_{0+}^+ est le paramètre de portée effective;

Σ_0 est un terme constant englobant les contributions d'ordres supérieurs dans le développement (20). L'évaluation théorique de cette constante donne (cf. réfs [13] et [14]) $\Sigma_0 = -12.6 \text{ MeV}$.

Ces trois premières étapes, théoriques, ont donc permis de mettre en relation le terme σ avec les amplitudes de diffusion au seuil. Les mesures de diffusion élastique $\pi^\pm p \rightarrow \pi^\pm p$ complètent cette démarche par la détermination expérimentale des paramètres $a_{0+}^\pm$, $a_{1+}^\pm$ et $b_{0+}^\pm$. Mais cette détermination ne peut se faire de manière directe. En effet, il n'est pas possible de mesurer des sections efficaces différentielles pour des énergies nulles. Les données actuellement disponibles (cf. réf. [14]) ne couvrent le domaine des (très) basses énergies que jusqu'à 20.8 MeV (én. cinétique du pion dans le laboratoire). Il s'agit donc, dans cette quatrième et dernière étape, d'extrapoler à énergie nulle les résultats des mesures de diffusion $\pi^\pm p$ pour obtenir les valeurs au seuil des amplitudes de diffusion. Ce travail a été réalisé par le "Karlsruhe group" (cf. réf. [4]) au moyen de l'analyse en phases des mesures de diffusion $\pi^\pm p$ (cf. réf. [3]). Les équations (19) et (20) permettent alors de calculer la valeur du terme σ à partir de la détermination expérimentale des paramètres $a_{0+}^\pm$, $a_{1+}^\pm$ et $b_{0+}^\pm$. Le résultat donné par R. Koch dans la réf. [15] conduit à

$$\sigma = 59 \pm 8 \text{ MeV}. \quad (21)$$

Cette valeur diffère notablement de celle donnée par (16) qui est calculée théoriquement. Elle impliquerait que le terme y de (15) n'est pas nul, mais de l'ordre de 0.4. Cela signifierait que la masse du proton est due en grande partie au quark étrange ce qui se comprendrait mal à la lumière de QCD (cf. refs [12] et [13]). Des recherches théoriques et expérimentales sont actuellement en cours [14] dans le but de clarifier ce point.

D'autre part, nous avons vu ci-dessus qu'une détermination de la longueur de diffusion $a_{0+}^\pm$, effectuée en 1985 par des mesures sur l'hydrogène pionique, confirme la valeur théorique de σ , apportant la confusion à laquelle nous faisons allusion en préambule.

I.3.4 Relations avec l'atome π^-H

Après avoir vu comment s'effectue la liaison entre la théorie (QCD et symétrie chirale) et l'expérience (mesure des longueurs de diffusion), il nous reste à montrer que l'atome d'hydrogène pionique permet lui-aussi de déterminer la longueur de diffusion $a_{0+}^{\pi^-p}$ à partir de la mesure d'une transition radiative sur l'état $1S$. Une description détaillée des caractéristiques de l'atome π^-H suivra dans le § I.4, nous nous limitons ici à décrire les relations permettant de déduire $a_{0+}^{\pi^-p}$.

Deux interactions déterminent les niveaux d'énergie de l'atome π^-H . La première, à longue portée, est l'interaction de Coulomb. Elle domine et fixe la structure générale du spectre énergétique. La seconde est l'interaction forte qui ne se manifeste qu'à courte portée en modifiant légèrement les niveaux coulombiens. On peut se représenter ce système comme la superposition de deux fonctions d'onde: ψ_{nl}^C , fonction d'onde coulombienne de l'atome π^-H avec un noyau supposé ponctuel, et ψ^{nucl} , fonction d'onde nucléaire, qui détermine l'extension du proton formant le

noyau ($\approx 0.8 \text{ fm}$). Comme l'interaction forte est à courte portée, elle ne devient effective que lorsque les deux fonctions d'onde se recouvrent suffisamment, à savoir lorsque le π^- se trouve dans l'état S .

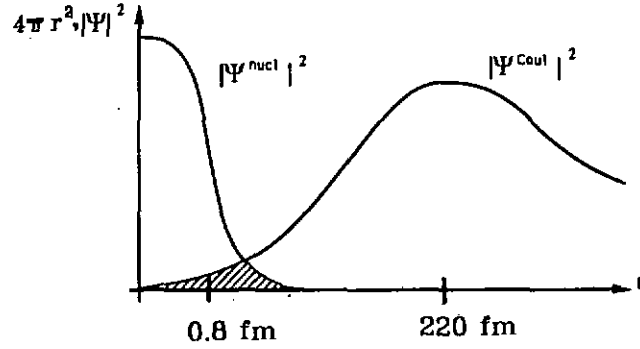


Figure 4: Recouvrement de la densité nucléaire par la densité de probabilité de présence du π^- soumis à l'interaction de Coulomb.

Le déplacement d'interaction forte des niveaux coulombiens est alors donné par l'élément de matrice

$$\Delta E_f = \langle \pi^- p | H_f | \pi^- p \rangle, \quad (22)$$

où: H_f est le hamiltonien d'interaction forte, et $|\pi^- p\rangle$ est l'état qui représente le système $\pi^- p$.

Si le π^- est éloigné du proton (l grand), le recouvrement est très faible et l'interaction forte ne se manifeste pratiquement pas: les niveaux d'énergie sont essentiellement coulombiens. Mais lorsque l diminue, le recouvrement augmente fortement car du fait de la masse élevée du π^- ($m_{\pi^-} \approx 140 \text{ MeV}/c^2$), le rayon de Bohr de l'atome $\pi^- H$ est petit ($r_B \approx 222 \text{ fm}$). Dans ce cas le déplacement ΔE_f n'est plus négligeable.

Nous verrons dans le § I.4 que ce recouvrement est essentiellement non-nul seulement pour les états avec $l = 0$. C'est pour le niveau $1S$ — là où le π^- pénètre fortement dans le proton — qu'il est maximal et que l'interaction forte se manifeste de la façon la plus prononcée. Deux effets la révèlent: d'une part le niveau $1S$ est déplacé d'une quantité ϵ_{1S} , c'est le *déplacement d'interaction forte*, d'autre part le niveau est élargi d'une quantité Γ_{1S} , c'est l'*élargissement d'interaction forte*. ϵ_{1S} et Γ_{1S} sont proportionnels au recouvrement des deux fonctions d'onde mentionnées précédemment (voir réf. [9]).

L'effet d'élargissement est dû à l'existence du canal de désintégration $\pi^- p \rightarrow \pi^0 n$. Le π^- a une probabilité non-nulle d'être absorbé, ce qui diminue le temps de vie du π^- sur le niveau $1S$. Les relations d'incertitude de Heisenberg nous apprennent que ceci se traduit par un élargissement du niveau ($\Gamma_{1S} \cdot \tau_{1S} \approx \hbar$).

Le schéma ci-dessous permet de faire une synthèse des remarques précédentes.

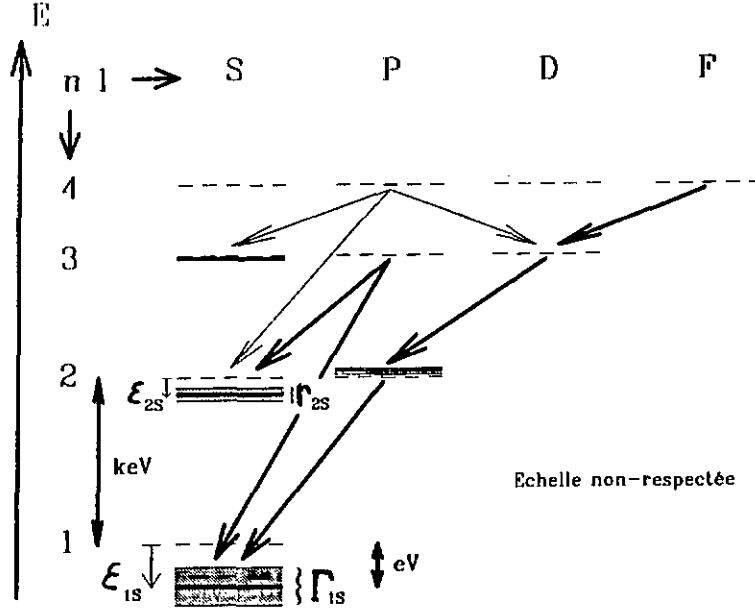


Figure 5: Niveaux d'énergie dans l'atome π^-H : structure générale (— — — —) fixée par l'interaction de Coulomb; ϵ_{nl} et Γ_{nl} dus à l'interaction forte.

Le déplacement ϵ_{1S} et l'élargissement Γ_{1S} peuvent être combinés en une seule grandeur complexe

$$\Delta E_{1S} = \epsilon_{1S} - i \frac{\Gamma_{1S}}{2}, \quad (23)$$

qui représente l'effet global de l'interaction forte sur le niveau $1S$ de π^-H .

Les auteurs de la réf. [16] ont montré que ΔE_{1S} pouvait être relié à la longueur de diffusion d'onde S $a_0^{\pi^-p}$ au moyen de la formule de Deser:

$$\Delta E_{1S} = -\frac{4}{r_\pi} |E_{1S}| a_0^{\pi^-p}, \quad (24)$$

où: E_{1S} = énergie du niveau $1S$;

r_π = rayon de Bohr pour π^-H ;

$a_0^{\pi^-p}$ = longueur de diffusion d'onde S .

La longueur de diffusion est considérée ici comme une grandeur complexe. Ses parties réelle et imaginaire peuvent s'exprimer au moyen de combinaisons des longueurs de

diffusion a_1 et a_3 (cf. réf. [17]):

$$\begin{aligned}\Re[a_0^{\pi^-p}] &= \frac{1}{3}(2a_1 + a_3) \\ \Im[a_0^{\pi^-p}] &= \frac{2}{9}Q_0 \cdot \left(1 + \frac{1}{P}\right) \cdot (a_1 - a_3)^2\end{aligned}\quad (25)$$

avec:

Q_0 = impulsion du π^0 issu de $\pi^-p \rightarrow \pi^0n$;

$Q_0 = \sqrt{2 \frac{m_{\pi^0} m_p}{m_{\pi^0} + m_p} (m_{\pi^-} + m_p - m_{\pi^0} - m_n - B)}$, avec B = énergie de liaison électromagnétique;

P = rapport de Panofsky.

En combinant les expressions (23), (24) et (25) on trouve les relations entre ϵ_{1S} , Γ_{1S} et les longueurs de diffusion a_1 et a_3 :

$$\begin{aligned}\epsilon_{1S} &= -\frac{4}{r_\pi} |E_{1S}| \left[\frac{1}{3}(2a_1 + a_3) \right] \\ \Gamma_{1S} &= \frac{16}{9} \frac{Q_0}{r_B} \left(1 + \frac{1}{P}\right) |E_{1S}| (a_1 - a_3)^2.\end{aligned}\quad (26)$$

L'ordre de grandeur de ces paramètres peut se calculer à partir des valeurs de a_1 et a_3 disponibles dans la littérature. Ces valeurs, variables selon les références, sont les suivantes (réf. [18]):

$$a_1 \approx 0.185 \text{ fm à } 0.240 \text{ fm}$$

$$a_3 \approx -0.124 \text{ fm à } -0.145 \text{ fm}.$$

Avec les valeurs ci-dessous pour les constantes:

$$|E_{1S}| = 3246 \text{ eV (voir § I.4.4)}$$

$$r_B = 222.56 \text{ fm}$$

$$m_{\pi^-} = 139.57 \text{ MeV}$$

$$m_{\pi^0} = 134.97 \text{ MeV}$$

$$m_p = 938.27 \text{ MeV}$$

$$m_n = 939.57 \text{ MeV}$$

$$B \cong 3.2 \text{ keV}$$

$$Q_0 = 27.93 \text{ MeV}/c = 0.1416 \text{ fm}^{-1}$$

$$P = 1.543 \pm 0.008 \text{ (voir réf. [19])}$$

on trouve les ordres de grandeur cherchés:

$$\begin{aligned} -6.5 \text{ eV} &\leq \varepsilon_{1S} \leq -4.8 \text{ eV} \\ 0.58 \text{ eV} &\leq \Gamma_{1S} \leq 0.88 \text{ eV} \end{aligned} \quad (27)$$

Une précédente mesure de ε_{1S} (cf. réf. [2]) avait donné le résultat $\varepsilon_{1S} = -4.9 \pm 0.7 \text{ eV}$ dont on déduit une combinaison $(2a_1 + a_3)$ compatible avec la valeur théorique (16) du terme σ . Nous avons déjà mentionné cette concordance dans le § I.2, ainsi que le désaccord avec d'autres déterminations.

I.4 Physique de l'atome π^-H

L'hydrogène pionique appartient à la catégorie des atomes dits *exotiques* dans lesquels un électron est remplacé par un lepton ou un méson négatif (μ^- , π^- , K^- , etc...). Ces atomes doivent être créés artificiellement car le temps de vie réduit des mésons — le plus grand vaut $2.2 \mu\text{sec}$ pour le μ^- — ne leur permet pas d'exister longtemps. Ce temps de vie est toutefois suffisant pour que le processus de formation puisse avoir lieu: le ralentissement, la capture et les transitions atomiques qui amènent le méson au voisinage du noyau prennent environ 10^{-12} sec . Le π^- ayant une durée de vie $\tau_{\pi^-} = 2.6 \cdot 10^{-8} \text{ sec}$, on peut considérer l'atome π^-H comme un système stable sur lequel des observations sont possibles.

Une description des caractéristiques générales des atomes exotiques, et des atomes pioniques en particulier, est présentée dans les références [9], [20], [21] et [22].

I.4.1 Formation et cascade

L'atome π^-H est produit en ralentissant un faisceau de π^- de telle sorte que leur énergie cinétique soit réduite suffisamment pour qu'ils puissent être capturés dans le champ coulombien du noyau d'hydrogène. On distingue essentiellement cinq processus intervenant dans le freinage puis lors de la cascade du π^- . Nous résumons ci-dessous la description qui en est faite dans la réf. [22].

1^o. Thermalisation du π^-

Dans un premier temps, le π^- est ralenti en traversant de la matière. Il perd son énergie cinétique lors des collisions avec les atomes se trouvant sur sa trajectoire en les ionisant. Ce phénomène est bien connu et permet de réduire suffisamment la vitesse du π^- pour qu'il puisse être capturé.

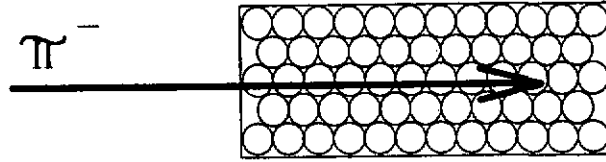


Figure 6: *Thermalisation du π^- par collisions. La perte d'énergie résulte de la ionisation des atomes.*

2°. Capture atomique

Lors du processus de capture, l'électron de l'atome d'hydrogène est éjecté et le π^- se lie au proton sur une orbite élevée.

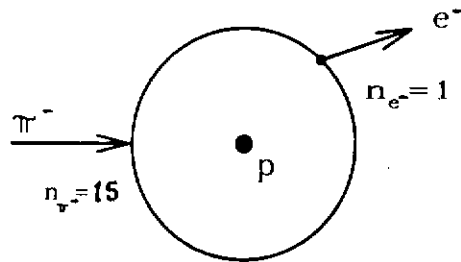


Figure 7: *Capture atomique du π^- : $\pi^- + e^-p \longrightarrow \pi^-p + e^-$.*

On peut montrer (réf. [22]) que cette capture ne peut avoir lieu que sur une orbite dont le rayon est comparable à celui de l'état $1S$ de l'hydrogène. Cette orbite est de l'ordre de $n \cong 15$ pour le π^- et correspond à une énergie de liaison proche de l'énergie de ionisation de l'hydrogène ($\approx 14 \text{ eV}$). Lors de sa formation, l'atome π^-H se trouve donc dans un état excité et se désexcite selon les trois processus décrits ci-dessous.

3°. Désexcitation radiative

Par ce mécanisme bien connu des physiciens atomistes, le π^- transite depuis les orbites supérieures sur des niveaux inférieurs et perd son énergie en émettant un photon.

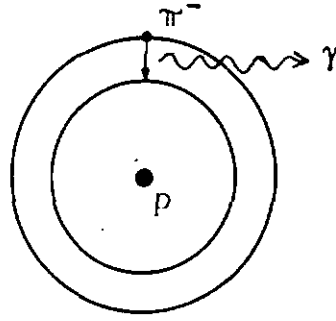


Figure 8: *Transition atomique: $\pi^-p \longrightarrow \pi^-p + \gamma$. L'énergie du photon émis correspond à la différence d'énergie de liaison des niveaux entre lesquels s'effectue la transition.*

Ce processus nous intéresse particulièrement puisque c'est une transition radiative sur le niveau $1S$ que nous mesurons dans notre expérience.

4°. Emission Auger externe

Autre phénomène bien connu en physique atomique, l'effet Auger se caractérise par l'éjection d'un électron des couches supérieures d'un atome provoquée par une transition non-radiative d'un électron des couches inférieures. Dans le cas de l'hydrogène pionique, l'effet Auger ne peut se produire sur l'atome lui-même puisque l'électron a été éjecté lors de la formation de l'atome. L'émission d'un électron se produit sur un atome électronique voisin, d'où le qualificatif d'*externe*. Le π^- transite donc non-radiativement dans l'atome π^-H et c'est un atome d'hydrogène voisin qui est ionisé.

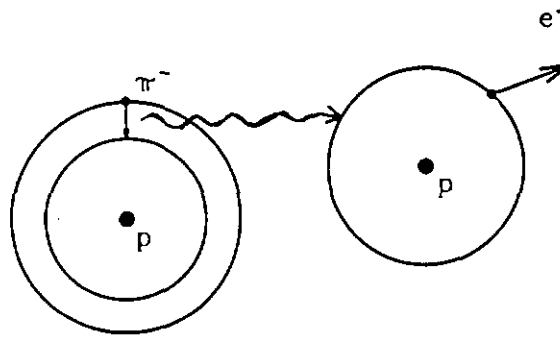


Figure 9: *Effet Auger externe: $\pi^-p + e^-p \longrightarrow \pi^-p + p + e^-$.*

5°. Collision nucléaire élastique et inélastique

Ce dernier phénomène peut paraître surprenant: il s'agit d'une collision d'un atome π^-H avec un proton voisin. Ceci est rendu possible par le fait que l'atome π^-H est très petit et on peut l'assimiler à une "particule" neutre comparativement à la taille de l'atome d'hydrogène. Cette "particule" ne subit pas la répulsion électrostatique des électrons des atomes avoisinants et peut donc s'approcher suffisamment du noyau protonique pour entrer en collision avec lui.

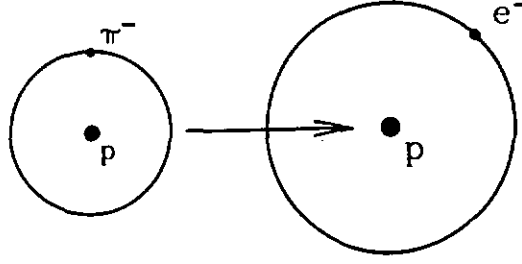


Figure 10: *Collision nucléaire: $\pi^- p + e^- p \longrightarrow \pi^- p + e^- p$.*

La collision est soit élastique, soit inélastique. Dans le premier cas le π^- ne change pas de niveau, l'énergie cinétique de $\pi^- H$ est simplement répartie entre les deux atomes. Dans le cas inélastique, la collision provoque une transition du π^- et l'excédent d'énergie qui en résulte augmente l'énergie cinétique des deux atomes.

Une estimation du temps de la cascade radiative a été faite par G.A. Rinker (cf. réf. [22]): $\tau_{\pi-H}(n = 15 \rightarrow 1) \cong 10^{-9} \text{ sec}$. Il compare ensuite cette valeur au résultat mesuré incluant tous les processus: $\tau_{\pi-H}(n = 15 \rightarrow 1) \cong 2 \cdot 10^{-12} \text{ sec}$, et il en conclut que les mécanismes d'émission Auger et de collision nucléaire réduisent drastiquement le temps de vie de l'atome $\pi^- H$.

Lorsqu'il veut étudier les niveaux énergétiques de l'atome $\pi^- H$, seuls les processus de transition radiative et l'effet Auger intéressent l'expérimentateur. En effet, en mesurant l'énergie des photons ou des électrons émis, on peut en déduire la différence d'énergie des niveaux entre lesquels la transition s'est produite. Plusieurs auteurs se sont penchés sur la formulation théorique du problème de la cascade du méson pour en déduire quantitativement des taux de transitions (voir réfs [23]–[28]). Ce problème sortant du cadre de ce travail, nous nous limitons à en résumer les aspects phénoménologiques principaux.

Ainsi que nous l'avons mentionné, le pion est d'abord capturé sur des orbites élevées ($n \approx 15$), puis cascade sur les niveaux inférieurs en perdant son énergie principalement par émissions radiatives et Auger. On peut montrer [9] que la cascade s'effectue essentiellement par des orbites *circulaires*, c'est-à-dire avec $l = n - 1$.

La masse du pion étant beaucoup plus grande que celle de l'électron, le rayon de Bohr ($r_B \propto 1/m$) est réduit pour $\pi^- H$ dans le rapport des masses $\frac{m_{\pi^-}}{m_e} \cong 273$. L'orbite du π^- se trouve très rapidement à l'intérieur de l'orbite 1S de l'électron (dès que $n \leq 15$).

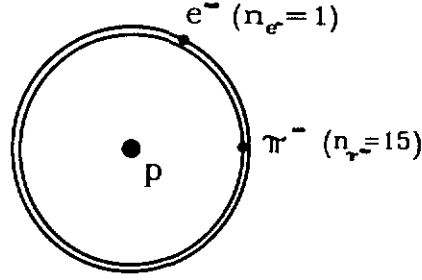


Figure 11: Atome d'hydrogène et atome π^-H : l'orbite électronique $n = 1$ correspond à l'orbite pionique $n = 15$.

En cascasant sur les niveaux inférieurs, le π^- s'approche sensiblement du proton qui n'apparaît plus comme une particule ponctuelle, mais comme une densité de charge nucléaire. La distance séparant le pion du proton est alors suffisamment faible pour que l'interaction forte commence à se manifester. Les niveaux d'énergie coulombiens sont légèrement modifiés de la manière décrite dans le § I.3.4.

Les mesures des déplacements d'interaction forte dans les atomes pioniques montrent que l'interaction π^- -proton est faiblement *attractive*, alors que l'interaction π^-n est *répulsive* (cf. [9]). ϵ_{1S} est donc *négatif* pour π^-H , ce qui, avec π^-He^3 , constitue une exception due à l'excès de protons du noyau. En effet, l'interaction π^-n étant plus répulsive que l'interaction π^-p n'est attractive, l'interaction π^- -noyau est globalement *répulsive* pour tous les atomes pioniques autres que π^-H et π^-He^3 . On mesure donc en général un déplacement d'interaction forte *positif*.

I.4.2 Calcul des niveaux de π^-H

Nous avons déjà mentionné (§ I.3.4 et fig. 5) que la structure générale des niveaux énergétiques de π^-H est fixée par l'interaction électrostatique à longue portée. En admettant l'hypothèse d'un noyau ponctuel, le potentiel de Coulomb s'écrit, dans les unités où $\hbar = c = 1$,

$$V_C(r) = -\frac{\alpha}{r}, \quad (28)$$

où α est la constante de structure fine.

Dans le cas non-relativiste l'équation de Schrödinger décrirait très bien le système π^-p , mais la masse du π^- étant grande, le cadre relativiste est mieux adapté. Il convient donc d'utiliser l'équation de Klein-Gordon pour calculer les niveaux de π^-H . Cette équation décrit correctement le comportement des particules sans spin dans le cadre relativiste.

Sa forme est la suivante:

$$\left\{ \Delta + (E - V_C)^2 - \mu^2 \right\} \psi(\vec{r}) = 0, \quad (29)$$

avec:

Δ = opérateur de Laplace;

E = valeur propre de l'énergie;

V_C = potentiel de Coulomb;

$\mu = \frac{m_\pi - m_\nu}{m_\pi + m_\nu}$ = masse réduite du système $\pi^- p$;

$\psi(\vec{r})$ = fonction d'onde, solution de l'équation de Klein-Gordon.

La résolution de cette équation (voir réfs [29] ou [9]) permet de trouver les fonctions propres du système $\psi_{nlm}(\vec{r})$. L'expression mathématique de ces solutions ne nous est pas utile ici, on pourra la trouver dans la réf. [9] (pp. 63 et suiv.). Seules nous intéressent les valeurs propres de l'énergie, valeurs propres déterminées par les conditions que doivent satisfaire les $\psi_{nlm}(\vec{r})$. La formule générale donnant ces valeurs propres, englobant l'énergie de masse, s'exprime par

$$E_{nl}^{KG_{tot}} = \mu \cdot \left[1 + \left(\frac{\alpha}{n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (30)$$

où: μ = masse réduite;

α = constante de structure fine;

n = nombre quantique principal;

l = nombre quantique orbital.

Remarquons que contrairement au cas non-relativiste où, sans tenir compte de l'énergie de masse,

$$E_n^{non-rel} = -\mu \frac{\alpha^2}{2n^2},$$

la dégénérescence en l est levée dans (30). Ceci résulte du fait que les orbites du problème de Képler relativiste ne sont pas fermées et elles précèdent, contrairement au cas non-relativiste où elles sont fermées.

L'expression (30) peut être développée en puissances de α et, en négligeant les termes d'ordre α^6 et supérieurs, on obtient

$$E_{nl}^{KG_{tot}} = \mu \left[1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha^4}{2n^4} \left(\frac{2n}{2l+1} - \frac{3}{4} \right) - \mathcal{O}(\alpha^6) \right]. \quad (31)$$

Comme seule l'énergie de liaison nous intéresse, on soustrait le terme d'énergie de masse pour aboutir finalement à la relation

$$E_{nl}^{KG} = -\frac{\mu\alpha^2}{2n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{2n}{2l+1} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (32)$$

On reconnaît le premier terme: c'est l'expression non-relativiste des niveaux d'énergie. Le deuxième terme correspond à la correction relativiste du premier ordre. L'omission des termes d'ordre supérieur à α^4 est justifiée, car en supposant qu'il soit possible de mesurer une énergie de transition avec une telle précision, l'erreur introduite par l'hypothèse d'un noyau ponctuel est bien supérieure à la contribution des termes négligés. D'autre part, nous verrons ci-dessous que les valeurs de E_{nl} données par (32) doivent être corrigées pour tenir compte de l'influence de différents effets passés sous silence jusqu'ici.

I.4.3 Correction des niveaux coulombiens de π^-H

Dans le calcul des niveaux effectué précédemment, nous n'avons tenu compte que de l'interaction électrostatique $V_C(r)$ entre le π^- et le proton, ce dernier étant supposé ponctuel. En réalité, plusieurs effets viennent modifier légèrement les niveaux E_{nl}^{KG} calculé avec l'équation de Klein-Gordon (voir réfs. [20] et [21]). Nous citons ces effets par ordre d'importance des corrections qu'ils impliquent et les expliquerons ensuite. Il s'agit

- 1°. du *déplacement d'interaction forte*: ε_{nl} ;
- 2°. de l'effet de *polarisation du vide*: ΔE_{nl}^{VP} ;
- 3°. de l'effet de *taille finie du noyau*: ΔE_{nl}^{FS} ;
- 4°. de l'effet d'*interaction "spin-orbite" du proton*: ΔE_{nl}^{SO} ;
- 5°. de l'effet de *polarisation nucléaire* ΔE_{nl}^{NP} .

En tenant compte de ces corrections, qui dépendent du niveau considéré, nous pouvons écrire l'énergie des niveaux sous la forme

$$E_{nl} = E_{nl}^{KG} + \varepsilon_{nl} + \Delta E_{nl}^{VP} + \Delta E_{nl}^{FS} + \Delta E_{nl}^{SO} + \Delta E_{nl}^{NP}. \quad (33)$$

Nous donnons ci-dessous les valeurs de ces corrections.

1^o. Déplacement d'interaction forte

Il s'agit de la grandeur que nous désirons mesurer et dont nous avons parlé dans le § I.3.4. Précisons encore que cet effet se manifeste essentiellement pour les orbites circulaires inférieures ($l = n - 1$ et n petit). Ceci est dû au fait que la cascade du π^- s'effectue principalement par ces états circulaires, et c'est pour ceux-ci que le pion pénètre le plus profondément dans le noyau. Dans notre cas, on peut montrer que cet effet est négligeable pour les niveaux $2P$ et $3P$ comparativement au déplacement du niveau $1S$. Il n'en va pas de même pour les atomes pioniques plus lourds, où le pion s'approche davantage du noyau.

2^o. Polarisation du vide

Cet effet apporte la correction majeure après celle due à l'interaction forte. Il ne peut être décrit que par l'électrodynamique quantique (QED), dans le cadre des corrections radiatives. Nous le résumons succinctement ici, une explication plus détaillée est donnée dans les références [9] et [32].

En QED, l'interaction électromagnétique entre particules chargées est décrite par l'échange de photons. Lors de ces échanges peuvent apparaître des états intermédiaires, en l'occurrence la création virtuelle de paires fermions-anti-fermions. On peut représenter ceci par un diagramme de Feynman de la forme suivante, où la partie hachurée représente tous les états intermédiaires possibles.

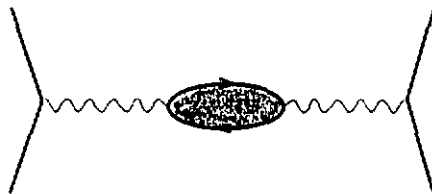


Figure 12: *Interaction électromagnétique entre particules chargées: le photon échangé peut créer virtuellement des états fermions-antifermions.*

Il résulte de ce phénomène une modification de la force entre les particules. La portée de cet effet dépend de la masse des fermions apparaissant dans les états intermédiaires; elle est donnée par la longueur d'onde de Compton correspondante $\lambda_C = \frac{h}{mc}$. Pour les fermions les plus légers — e^- et μ^- — nous avons

$$\lambda_C(e) = 386.16 \text{ fm} \text{ et } \lambda_C(\mu) = 1.87 \text{ fm} .$$

Ces valeurs sont à comparer à la distance caractéristique entre π^- et proton donnée par le rayon de Bohr $r_\pi = 222.56 fm$. On en déduit, pour l'atome π^-H , que les seules contributions importantes à l'effet de polarisation du vide proviennent des états intermédiaires faisant intervenir des paires e^+e^- .

Comme pour la polarisation électrique des diélectriques, on a, pour la polarisation du vide, un effet d'écrantage du champ coulombien produit par le noyau. Tout se passe comme si la charge électrique du noyau augmentait lorsque le π^- s'en approche: celui-ci se voit attiré plus fortement. On a donc $\Delta E_{nl}^{VP} < 0$.

Quantitativement, l'effet de polarisation du vide est décrit par un potentiel qui se superpose au potentiel de Coulomb. Il se calcule à partir des graphes de Feynman pour les ordres successifs en la constante de couplage α . Les diagrammes pour les deux premiers ordres sont les suivants:

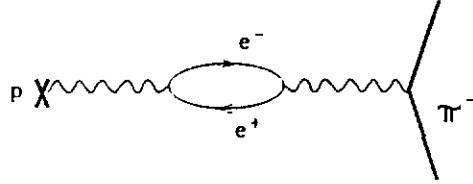


Figure 13: *Polarisation du vide: correction d'ordre $\alpha Z\alpha$.*

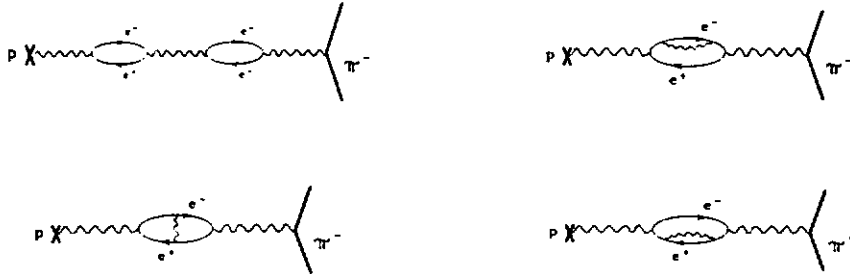


Figure 14: *Polarisation du vide: corrections d'ordre $\alpha Z\alpha^2$.*

Si, comme nous le faisons ici, on ne considère que le premier ordre (en $\alpha Z\alpha$), on peut montrer que le calcul donne le *potentiel de Uehling* (cf. [9] et [33]). En tenant compte d'une extension du noyau à symétrie sphérique, ce potentiel s'écrit (cf. réf. [34]):

$$V^{VP}(r) = -\frac{2}{3} \frac{\alpha e^2 \lambda_e}{r} \int_0^\infty dr' r' \rho(r') \left[K_0 \left(\frac{2}{\lambda_e} |r - r'| \right) - K_0 \left(\frac{2}{\lambda_e} |r + r'| \right) \right], \quad (34)$$

où $\rho(r')$ est la densité de charge nucléaire à symétrie sphérique;

et la fonction $K_0(x)$ est définie comme suit:

$$K_0(x) = \int_0^\infty dt e^{-xt} \left(\frac{1}{t^3} + \frac{1}{2t^5} \right) \sqrt{t^2 - 1}. \quad (35)$$

L'évaluation directe de l'expression (34) requiert un gros effort calculatoire sur ordinateur. Des approximations permettant de réduire le temps de calcul ont été développées par divers chercheurs (cf. [34], [35] et [36]). En particulier, on trouve dans la réf. [34] une méthode pour évaluer précisément le potentiel de Uehling.

La correction qu'amène ce potentiel sur les niveaux de l'atome π^-H est faible. On peut donc l'évaluer par un calcul de perturbations au premier ordre. La valeur moyenne de V^{VP} sur l'état ψ_{nl} non-perturbé est donnée par:

$$\Delta E_{nl}^{VP} = \langle \psi_{nl} | V^{VP} | \psi_{nl} \rangle. \quad (36)$$

Les résultats de ces calculs sont les suivants:

$$\Delta E_{1S}^{VP} = -3.242 \text{ eV}$$

$$\Delta E_{2P}^{VP} = -0.036 \text{ eV}$$

$$\Delta E_{3P}^{VP} = -0.026 \text{ eV}$$

3°. Effet de taille finie du noyau

Contrairement à l'hypothèse faite dans le calcul des niveaux d'énergie coulombiens de π^-H , le noyau n'est pas ponctuel: le proton se présente comme une *distribution de charge*. Pour les états avec n petit, la fonction d'onde correspondante recouvre en partie la densité de charge nucléaire, ce qui signifie que le pion passe une fraction de son temps "à l'intérieur" du proton. Il ne "ressent" alors plus qu'une partie de la charge totale. L'effet résultant consiste en une *diminution du potentiel électrostatique* qui apparaît moins attractif. Le niveau considéré subit donc un *déplacement positif* $\Delta E_{nl}^{FS} > 0$. Ce déplacement est maximal pour l'état $1S$, puisque c'est pour celui-ci que le π^- se trouve le plus fréquemment "dans" le noyau, et diminue très rapidement lorsque n augmente.

On trouvera dans les références [20] et [21] des formules approximées permettant d'estimer l'ordre de grandeur de cet effet. Pour notre part, nous avons calculé la valeur de ΔE_{1S}^{FS} en nous basant sur une méthode de calcul suggérée par J.-F. Germond (réf. [17]). Nous la décrivons ci-dessous.

La petite extension du proton ($\approx 0.8 \text{ fm}$) permet de traiter le problème au premier ordre des perturbations:

$$\Delta E_{1S}^{FS} = \langle \psi_{1S}^c | V^{FS} | \psi_{1S}^c \rangle, \quad (37)$$

où: ψ_{1S}^c = fonction d'onde coulombienne de l'état $1S$ pour une charge ponctuelle.
Nous prenons ici la solution de l'équation (non-relativiste) de Schrödinger qui diffère peu de la solution de Klein-Gordon.

$V^{FS} = \int d^3r' \left[\frac{\rho_N(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right]$ est la perturbation, i.e. la diminution du potentiel de Coulomb, et $\rho_N(\vec{r}')$ est la densité de charge nucléaire et les unités sont celles où $\hbar = c = 1$.

Il s'agit donc de calculer

$$\Delta E_{1S}^{FS} = \int d^3r |\psi_{1S}^c(\vec{r})|^2 \left\{ \int d^3r' \left[\frac{\rho_N(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right] \right\}. \quad (38)$$

Comme $\rho_N(\vec{r})$ s'annule rapidement en fonction de $\vec{r}$ et que $\psi_{1S}^c(\vec{r})$ varie peu sur le domaine où $\rho_N(\vec{r})$ est non-nulle, nous pouvons écrire

$$\Delta E_{1S}^{FS} \cong |\psi_{1S}^c(0)|^2 \int d^3r \int d^3r' \left[\frac{\rho_N(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right]. \quad (39)$$

En posant

$$\phi = \int d^3r' \left[\frac{\rho_N(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right],$$

la formule de Green nous permet d'écrire la relation

$$\int d^3r (\Delta r^2) \phi - \int d^3r r^2 \Delta \phi = \int_{\partial V} \left(\phi \frac{\partial r^2}{\partial \vec{n}} - \vec{\nabla}_{\vec{n}} \phi r^2 \right) \cdot d\vec{S} = 0.$$

En remarquant que

$$\int d^3r (\Delta r^2) \phi = 6 \int d^3r \phi,$$

on obtient l'égalité

$$\int d^3r \phi = \frac{1}{6} \int d^3r r^2 \Delta \phi. \quad (40)$$

Mais $\Delta \phi$ est relié à ρ_N par l'équation de Poisson

$$\Delta \phi = -4\pi \rho_N$$

et en remplaçant dans (40) on obtient

$$\int d^3r \phi = -\frac{2\pi}{3} \int d^3r r^2 \rho_N = -\frac{2\pi}{3} \langle r_N^2 \rangle \int d^3r \rho_N. \quad (41)$$

La dernière intégrale s'évalue facilement:

$$\int d^3r \rho_N = Z_1 Z_2 e^2,$$

et, finalement, la correction de taille finie est donnée par la relation

$$\Delta E_{1S}^{FS} \cong -\frac{2\pi}{3} Z_1 Z_2 e^2 |\psi_{1S}^c(0)|^2 \langle r_N^2 \rangle. \quad (42)$$

Dans l'approximation non-relativiste la fonction d'onde $1S$ est

$$\psi_{1S}^c(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_\pi^3}} e^{-\frac{r}{r_\pi}},$$

où r_π est le rayon de Bohr pour π^-H .

Les nombres de charges valent $Z_1 = -1$ et $Z_2 = 1$ et, en réintroduisant $\hbar$ et c , on obtient

$$\Delta E_{1S}^{FS} \cong \frac{2\pi}{3} \alpha \hbar c \frac{\langle r_N^2 \rangle}{r_\pi^3}. \quad (43)$$

Les valeurs numériques des constantes sont données à la fin du § I.4.3, sauf $\langle r_N^2 \rangle$. Pour le proton, on a $\langle r_N^2 \rangle = 0.656 \text{ fm}$ (réf. [17]). La correction de taille finie du noyau sur le niveau $1S$ vaut alors:

$$\Delta E_{1S}^{FS} \cong 0.057 \text{ eV}. \quad (44)$$

Nous constatons que cette valeur est deux ordres de grandeur plus faible que la correction de polarisation du vide, ce qui justifie l'omission de cette correction pour les niveaux supérieurs.

4°. Effet d'interaction "spin-orbite" du proton

L'équation utilisée pour décrire le système π^- -noyau est celle de Klein-Gordon. Cela est justifié par le fait que le π^- possède un spin nul et que, souvent, l'étude porte sur des noyaux dont le spin total est aussi nul. Dans notre situation, le noyau est formé d'un seul proton qui possède un spin $\frac{1}{2}$. En toute rigueur, il faudrait aussi tenir compte de l'interaction de ce spin avec le moment orbital $\vec{l}$.

Bien que notre démarche ne soit pas tout-à-fait rigoureuse, nous avons estimé l'effet du couplage du spin du proton avec le moment orbital ($j = l \pm \frac{1}{2}$) en utilisant l'expression des valeurs propres de l'énergie obtenue avec l'équation de Schrödinger. Etant donné la très faible amplitude de cet effet, cette approximation suffit pour obtenir l'ordre de grandeur de la correction.

$$\Delta E_{nlj}^{SO} = \frac{\mu \alpha^4}{n^3} \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l(l+1)(2l+1)}, \quad (45)$$

avec: μ = masse réduite du système π^-p ;

α = constante de structure fine;

n, l = nombres quantiques principal et orbital;

$$j = l \pm \frac{1}{2}.$$

Cette relation nous permet d'estimer l'effet du couplage spin-orbite sur les niveaux $2P$ et $3P$ (le niveau $1S$ n'est pas affecté, car dans ce cas le moment orbital l est nul).

$$\Delta E_{2P_{1/2}}^{SO} \cong -0.014 \text{ eV}$$

$$\Delta E_{2P_{3/2}}^{SO} \cong +0.007 \text{ eV}$$

$$\Delta E_{3P_{1/2}}^{SO} \cong -0.002 \text{ eV}$$

$$\Delta E_{3P_{3/2}}^{SO} \cong +0.001 \text{ eV}$$

Ces déplacements sont très faibles. Nous pouvons sans autre les négliger, compte tenu de la précision de notre mesure qui est de l'ordre de 1 eV.

5°. Effet de polarisation nucléaire

Microscopiquement, le pion apparaît constitué d'une paire quark-antiquark formant un dipôle électrique. Placé dans le champ électrique du noyau de l'atome $\pi^- H$, ce dipôle s'oriente de telle sorte que le champ local diminue. Symétriquement, le champ électrique du π^- polarise le proton. L'effet global se manifeste par un déplacement des niveaux d'énergie coulombiens. Ce déplacement est positif puisque la polarisation tend à diminuer le potentiel de Coulomb.

Les polarisabilités du proton et du π^- étant faibles, on peut évaluer le déplacement ΔE_{nl}^{NP} par un calcul de perturbations. Celui-ci est présenté dans la réf. [21] et donne le résultat suivant:

$$\Delta E_{nl}^{NP} = \frac{\alpha}{2} \hbar c (\alpha_p + \alpha_\pi) \left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle_{nl}, \quad (46)$$

où: α = constante de structure fine;

α_p = polarisabilité du proton;

α_π = polarisabilité du π^- ;

$\left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle_{nl}$ = valeur moyenne de l'opérateur $\frac{1}{r^4}$ sur l'état $|nl\rangle$.

Dans les états S , on a $\left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle = 0$ à cause de la symétrie sphérique des fonctions d'onde correspondantes. L'orientation dipolaire moyenne est nulle.

Pour calculer la valeur moyenne de $\frac{1}{r^4}$ sur l'état $2P$ nous utilisons les fonctions d'onde solution de l'équation de Schrödinger. On trouve alors

$$\left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle_{2P} = \left\langle 2P \left| \frac{1}{r^4} \right| 2P \right\rangle = \frac{1}{24 r_\pi^4}, \quad (47)$$

où $r_\pi = 222.568 \text{ fm}$ est le rayon de Bohr pionique.

Les valeurs des polarisabilités α_p et α_π sont prises dans la réf. [38]. Si celle du proton est assez bien connue

$$\alpha_p = (9 \pm 2) \cdot 10^{-4} \text{ fm}^3,$$

celle du π^- l'est beaucoup moins: les valeurs données par différents auteurs s'étalent sur trois ordres de grandeur (cf. [21] et [38]). Nous admettrons pour notre part une limite supérieure:

$$\alpha_\pi \leq 10^{-1} \text{ fm}^3.$$

En introduisant ces valeurs dans la relation (46) et en remplaçant $\langle \frac{1}{r^4} \rangle$ par l'égalité (47), on trouve une limite supérieure pour le déplacement du niveau $2P$ sous l'effet de polarisation nucléaire:

$$\Delta_{2P}^{NP} \leq 1.2 \cdot 10^{-6} \text{ eV} . \quad (48)$$

L'effet est donc totalement négligeable dans notre cas, ce qui n'est pas vrai pour les atomes pioniques lourds.

I.4.4 Transitions K_α et K_β de π^-H

Pour résumer les § I.4.2 et I.4.3, nous rassemblons dans le tableau ci-dessous les valeurs des diverses corrections, ce qui nous permet de calculer l'énergie des transitions $2P-1S$ et $3P-1S$ de l'atome π^-H .

En reprenant la relation (33) et en ignorant le déplacement d'interaction forte ε_{nl} , nous obtenons la valeur *théorique* de l'énergie des niveaux:

$$E_{nl}^{th} = E_{nl}^{KG} + \Delta E_{nl}^{VP} + \Delta E_{nl}^{FS} .$$

Nous avons calculé les valeurs numériques des niveaux E_{nl}^{KG} (éq. (32)) et des diverses corrections avec les valeurs suivantes des constantes, tirées des références indiquées:

$$1/\alpha = 137.0359895 \pm 0.04 \text{ ppm [30];}$$

$$\hbar c = 197.32705 \text{ MeV fm} \pm 0.9 \text{ ppm [30];}$$

$$m_p = 938.27231 \text{ MeV}/c^2 \pm 0.3 \text{ ppm [30];}$$

$$m_{\pi^-} = 139.56752 \text{ MeV}/c^2 \pm 4 \text{ ppm [31], corrigé pour les nouvelles constantes de conversion données dans [30];}$$

$$\mu = \frac{m_{\pi^-} m_p}{m_{\pi^-} + m_p} = 121.49518 \text{ MeV}/c^2 \pm 3.5 \text{ ppm ;}$$

Pour être complets, on donne aussi le rayon de Bohr pour π^-H (formule de la réf. [9]): $r_\pi = 222.563 \text{ fm}$.

Niveau	E_{nl}^{KG} [eV]	ΔE_{nl}^{VP} [eV]	ΔE_{nl}^{FS} [eV]	E_{nl}^{th} [eV]	Transitions $E_{K_{\alpha,\beta}}^{th}$ [eV]
1S	-3235.107	-3.242	+0.057	-3238.292	$E_{K_{\alpha}}^{th} = 2429.527$
2P	-808.729	-0.036	≈ 0	-808.765	
3P	-359.435	-0.026	≈ 0	-359.461	$E_{K_{\beta}}^{th} = 2878.831$

Table 1: Valeurs théoriques de l'énergie des transitions K_{α} et K_{β} de $\pi^{-}H$, sans le déplacement d'interaction forte.

En comparant ces valeurs théoriques aux valeurs $E_{K_{\alpha,\beta}}^{mes}$ mesurées expérimentalement, on en déduit le déplacement d'interaction forte. Comme ce déplacement est négligeable pour les niveaux 2P et 3P, nous avons finalement ϵ_{1S} donné par:

$$\epsilon_{1S} = E_{K_{\alpha,\beta}}^{th} - E_{K_{\alpha,\beta}}^{mes}. \quad (49)$$

Nous avons prévu initialement d'observer la transition la raie K_{α} , mais ne disposant d'aucune raie de calibration suffisamment proche, nous avons été amenés à choisir la transition K_{β} dont l'énergie est voisine de celle de la raie K_{α} de l'argon (2.9 keV) utilisée comme référence.

I.4.5 Effets perturbateurs

Indépendamment des effets inhérents aux diverses interactions existant entre le pion et le proton de l'atome $\pi^{-}H$ que nous venons de voir, il se manifeste certains phénomènes "externes" qui peuvent influencer la mesure des transitions radiatives. L'importance de ces effets dépend des conditions expérimentales et, si l'on n'y prend garde, les résultats peuvent être sérieusement modifiés.

Nous discutons dans ce paragraphe les trois phénomènes principaux, à savoir:

- 1°. L'effet Stark
- 2°. L'effet Doppler
- 3°. Les effets moléculaires

Les descriptions faites ici visent essentiellement l'aspect phénoménologique et ont pour but de mettre en relief les conséquences possibles de tels effets.

1^o. Effet Stark

Lorsqu'un atome est placé dans un champ électrique, certains niveaux énergétiques sont modifiés par ce qu'on appelle l'effet Stark. Sans entrer dans les détails théoriques qu'on pourra trouver dans les réfs [39] (description générale), [23] et [26] (atomes μ^-H et π^-H), nous pouvons décrire les caractéristiques principales de cet effet.

- Au premier ordre des perturbations, l'état $1S$ n'est pas affecté à cause de sa symétrie.
- Pour les états $n > 1$, l'effet Stark "mélange" les niveaux S et P et lève leur dégénérescence par une séparation du niveau en un doublet. Cette séparation est proportionnelle à l'intensité du champ électrique externe.

Dans le cas de l'hydrogène pionique, on peut considérer l'atome π^-H comme une "petite" particule neutre capable de traverser les atomes d'hydrogène environnants. Lorsqu'il se trouve entre le proton et l'électron de l'hydrogène, l'atome π^-H est soumis au champ électrique existant entre ces deux particules. Si la transition radiative $nP(nS)-1S$ s'effectue à ce moment-là, le niveau supérieur sera affecté par le champ électrique. Lorsque la résolution instrumentale n'est pas suffisante pour séparer le doublet Stark, l'effet global sera un élargissement de la raie mesurée.

D'autre part, du fait de l'hybridation temporaire des niveaux $nS-nP$, le π^- pourra, lors de sa cascade, arriver sur un état S supérieur ($n > 1$). Cela favorise son absorption par le noyau avant qu'il ait pu atteindre le niveau $1S$. En conséquence, le taux de production des rayons X mesurés se voit réduit, parfois de façon dramatique.

Nous avons estimé l'élargissement Γ^{Stark} du niveau $n = 2$ de π^-H lorsque l'atome se trouve à la distance $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ (rayon de Bohr électronique) d'un noyau d'hydrogène. La valeur obtenue est assez importante:

$$\Gamma^{Stark}(n = 2, r = a_0) \cong 0.4 \text{ eV} .$$

En réalité, l'atome π^-H ne se trouve pas constamment dans le champ électrique de l'atome d'hydrogène, et lorsqu'il s'y trouve il n'est pas toujours à la distance a_0 . La probabilité que la transition mesurée se fasse "dans" un atome d'hydrogène dépend des conditions de pression et température de la cible d'hydrogène. En fixant ces conditions, il est possible de calculer la fraction du temps τ que π^-H passe à l'intérieur des atomes avoisinants. Ce temps τ dépend des conditions de pression et température à travers le libre parcours moyen λ , ainsi que de la taille que l'on attribue aux atomes d'hydrogène. Il s'exprime simplement par la relation

$$\tau = \frac{2R_H}{\lambda + 2R_H} ,$$

où: R_H est le rayon attribué à l'atome d'hydrogène;

$\lambda = [\sqrt{2}\pi n(2R_H)^2]^{-1}$ est le libre parcours moyen et dépend de la densité n d'atomes que l'on détermine au moyen de la loi des gaz parfaits ($n = \frac{p}{KT}$).

Le tableau ci-dessous donne quelques valeurs calculées pour deux conditions de pression et température.

Conditions (T, p)	$R_H = a_0$	$R_H = 2a_0$	$R_H = 3a_0$
(25 K, 3 atm.)	0.5%	3.6%	11%
(33 K, 13 atm.)	1.5%	11%	29%

Table 2: Fraction du temps passé par π^-H dans l'atome d'hydrogène.

Nous avons ensuite calculé un "élargissement Stark" moyen à partir du modèle des gaz parfaits pour les deux conditions précédentes:

$$\bar{\Gamma}_{n=2}^{Stark}(T = 25 K, p = 3 atm.) \approx 0.015 eV$$

$$\bar{\Gamma}_{n=2}^{Stark}(T = 33 K, p = 13 atm.) \approx 0.030 eV .$$

On constate que cette contribution reste négligeable pour les conditions de pression et température données.

Nous n'avons malheureusement que très peu d'informations sur la diminution des taux de transitions due au mélange des niveaux subissant l'effet Stark. Il semblerait toutefois que l'absorption du π^- depuis les états S supérieurs ($n > 1$) soit importante, voire même très importante pour des densités de la cible correspondant à la phase liquide.

En conclusion, nous pouvons dire que dans tout les cas il convient mieux utiliser une cible d'hydrogène gazeux et de trouver le meilleur compromis entre une faible densité de la cible et un grand taux de production de rayons X.

2°. Effet Doppler

Lorsque la raie K_α (ou K_β) est émise par l'atome π^-H , celui-ci ne se trouve pas au repos. En effet, après le processus de formation et une partie de la cascade (cf. § I.4.1), il lui reste une énergie cinétique résiduelle. La direction de sa vitesse est distribuée statistiquement dans toutes les directions, en particulier dans celles allant vers l'observateur ou s'en éloignant. Or, nous savons qu'une radiation émise par une source en mouvement dans la direction d'observation subit *l'effet Doppler*: la fréquence mesurée par l'observateur est augmentée ou diminuée selon que la source s'approche ou s'éloigne. Globalement, on mesure un *élargissement* de la raie car statistiquement toutes les directions sont permises pour le mouvement des atomes émetteurs. Cet élargissement peut être facilement calculé si l'énergie cinétique résiduelle de π^-H au moment de la transition est connue. Au premier ordre en $\beta = \frac{v}{c}$ on a (cf. [22]):

$$\frac{\Gamma^{Doppler}}{E} = \sqrt{\frac{2T}{m}}, \quad (50)$$

où E = énergie de la radiation émise;

T = énergie cinétique de l'atome émetteur;

$m = M_{\pi^-} + m_p \cong 1078 \text{ MeV}$ est la masse totale de π^-H .

Dans l'hypothèse (réaliste) d'une énergie cinétique résiduelle $T = 10 \text{ eV}$ (cf. [22]), on calcule pour une raie d'énergie $E = 3 \text{ keV}$:

$$\Gamma^{Doppler} \cong 0.4 \text{ eV}. \quad (51)$$

Ce n'est donc pas un effet négligeable et il peut même influencer fortement sur le résultat d'une mesure de l'élargissement d'interaction forte, élargissement que nous avons estimé (éq. (27)) à $\Gamma_{15} \approx 0.6 - 0.8 \text{ eV}$.

La difficulté du problème de l'effet Doppler réside dans l'estimation correcte de l'énergie cinétique résiduelle de l'atome π^-H . Une première approximation peut être donnée par l'analyse des divers processus de désexcitation intervenant lors de la cascade (cf. § I.4.1). Celle-ci est faite par G.A. Rinker dans la réf. [22], d'où il ressort que seuls deux processus contribuent à augmenter l'énergie cinétique de π^-H . Le premier est la capture atomique (§ I.4.1, 2°) et fournit un supplément d'énergie $\leq 2 \text{ eV}$, ce qui demeure dans des limites acceptables. Le second est la collision nucléaire *inélastique* (§ I.4.1, 5°) et fournit une énergie supplémentaire d'environ $\frac{1}{2}\Delta E$, où ΔE est la différence d'énergie des niveaux entre lesquels la collision a induit la transition du π^- . Il existe donc une grande probabilité que l'atome π^-H acquiert une grande énergie cinétique, puisque l'énergie à disposition, libérée par la transition, peut être de l'ordre du keV. Un calcul précis paraît très difficile, mais l'analyse de résultats expérimentaux (cf. réf. [40]) semble confirmer cette hypothèse.

L'expérience à laquelle nous nous référons était destinée prioritairement à mesurer la

différence de masse $m_{\pi^-} - m_{\pi^0}$ en stoppant des π^- dans une cible d'hydrogène liquide. Elle a en plus permis de déterminer la distribution d'énergie cinétique des atomes π^-H au moment où le π^- est absorbé par le proton. Il s'avère que cette distribution présente une composante importante entre 0 et 1 eV, mais montre aussi une très longue "queue" s'étendant jusqu'à environ 50 eV.

Une estimation de l'élargissement Doppler a été faite pour notre expérience (voir réf. [41], p. 13), dans l'hypothèse que la distribution en vitesse des atomes lors de l'émission des rayons X soit la même que dans l'expérience [40]. Dans ce cas, en admettant une largeur naturelle $\Gamma_{1S} = 0.8 \text{ eV}$, l'effet Doppler augmenterait cette largeur de 0.13 eV, la portant à $\Gamma_{1S} = 0.93 \text{ eV}$. Cet élargissement correspond à une erreur de 8 % sur la combinaison $(a_1 - a_3)$, ce qui est acceptable, et, au demeurant, une mesure préalable de la distribution d'énergie cinétique de π^-H dans l'état 1S pour une cible gazeuse permettrait de tenir compte de manière précise de l'élargissement Doppler dans la détermination de Γ_{1S} .

3°. Effets moléculaires

Lorsque la densité de la cible d'hydrogène est grande (phase liquide ou proche de celle-ci), des effets moléculaires susceptibles de modifier les processus de désexcitation de π^-H peuvent apparaître. Ces effets sont décrits dans la réf. [42] pour l'atome μ^-H produit dans une cible d'hydrogène liquide. Nous n'avons pas d'informations concernant le cas de π^-H dans une cible gazeuse, mais nous pouvons raisonnablement supposer que ces effets sont très faibles si l'hydrogène se trouve à basse densité. Par contre, au voisinage de l'état liquide, il se pourrait que la proximité des molécules H_2 influence les transitions dans π^-H .

Dans ce cas également, une mesure des transitions K_α (ou K_β) en fonction de la densité de la cible au voisinage de la phase liquide devrait apporter une réponse à ces interrogations. Dans cette attente, nous ne pouvons que prescrire l'utilisation d'une cible gazeuse dont la densité ne soit pas trop élevée.

Résumé des effets perturbateurs

Nous avons vu que parmi les trois effets perturbateurs décrits, deux — l'effet Stark et les effets moléculaires — peuvent être limités dans leurs conséquences par l'utilisation d'une cible d'hydrogène de faible densité (gaz). Quant à l'effet Doppler, l'élargissement supplémentaire qui lui est dû semble suffisamment faible pour que la mesure de l'élargissement d'interaction forte ne soit pas compromise. Il est toutefois souhaitable d'entreprendre des mesures systématiques de la distribution de vitesse des atomes émetteurs pour connaître précisément la contribution de cet effet.

I.5 Choix d'un système de mesure

Le choix d'un système de mesure adapté à la détermination du déplacement ($\epsilon_{1S} \approx 5 \text{ eV}$) et de l'élargissement ($\Gamma_{1S} \approx 0.8 \text{ eV}$) d'interaction forte du niveau $1S$ de π^-H est conditionné par les difficultés expérimentales suivantes:

- 1°. L'énergie des rayons X K_α ($\sim 2.5 \text{ keV}$) ou K_β ($\sim 2.9 \text{ keV}$) est faible et une grande résolution est requise ($\approx 1 \text{ eV FWHM}$).
- 2°. Le taux de production de π^-H est faible (cible gazeuse).
- 3°. Le bruit de fond est important.

A notre connaissance, seuls les spectromètres à cristaux à diffraction de Bragg permettent d'atteindre une résolution de l'ordre de 1 eV dans la mesure de rayons X d'énergie aussi basse que $2-3 \text{ keV}$. Ces faibles énergies imposent le choix d'un spectromètre travaillant en réflexion. En effet, la profondeur utile pour la diffraction de rayons X de 2.5 keV n'est que de quelques microns ($2.5 \mu\text{m}$ pour le silicium), ce qui interdit l'utilisation d'un spectromètre en transmission (le cristal diffractant devrait être trop mince). Dans le but d'augmenter le taux de rayons X diffractés arrivant sur le détecteur, une géométrie à focalisation horizontale et verticale est requise.

Un tel spectromètre à cristaux de silicium a été réalisé dans le cadre de notre expérience. Il est décrit en détail dans le chapitre II, sa géométrie fait l'objet d'un paragraphe particulier (§ II.4).

Nous avons vu dans le § I.4.5 que le choix d'une cible d'hydrogène gazeux s'imposait afin d'éviter certains effets perturbateurs, en particulier l'effet Stark qui diminue le taux de transition. Malheureusement, la faible densité de la cible signifie aussi un faible pouvoir d'arrêt pour les pions et, par conséquent, un faible taux de rayons X émis. Toutefois, il est possible d'augmenter le taux de pions stoppés dans la cible en utilisant une trappe anticyclotron pour les ralentir. Celle-ci est décrite dans le § IV.2.1.

L'utilisation d'un spectromètre à cristal nécessite l'emploi d'un détecteur sensible à la position pour déterminer l'angle de diffraction des rayons X (angle de Bragg). Le faible taux de rayons X attendu nous a amené à choisir un détecteur fixe, ayant une grande résolution en position et une bonne résolution en énergie. La mesure de la position peut ainsi se faire sans utiliser de fente, ce qui diminuerait encore le taux de comptage, et la bonne résolution en énergie assure une meilleure discrimination du bruit de fond, ce qui augmente le rapport *signal/bruit*.

Les détecteurs répondant à ces exigences sont des détecteurs solides au silicium, les CCD (Charge-Coupled Devices). Leurs caractéristiques majeures sont les suivantes:

- Excellente résolution bidimensionnelle en position: $22\ \mu\text{m} \times 22\ \mu\text{m}$.
- Bonne efficacité de détection entre 2.5 et 3 keV: 55% à 75%.
- Bonne résolution en énergie entre 2.5 et 3 keV: 4% à 8%.
- Excellentes possibilités de réjection du bruit de fond.

Ces détecteurs sont décrits de manière approfondie dans le chapitre III.

Le système de mesure se présente donc sous la forme schématique générale illustrée par la figure suivante.

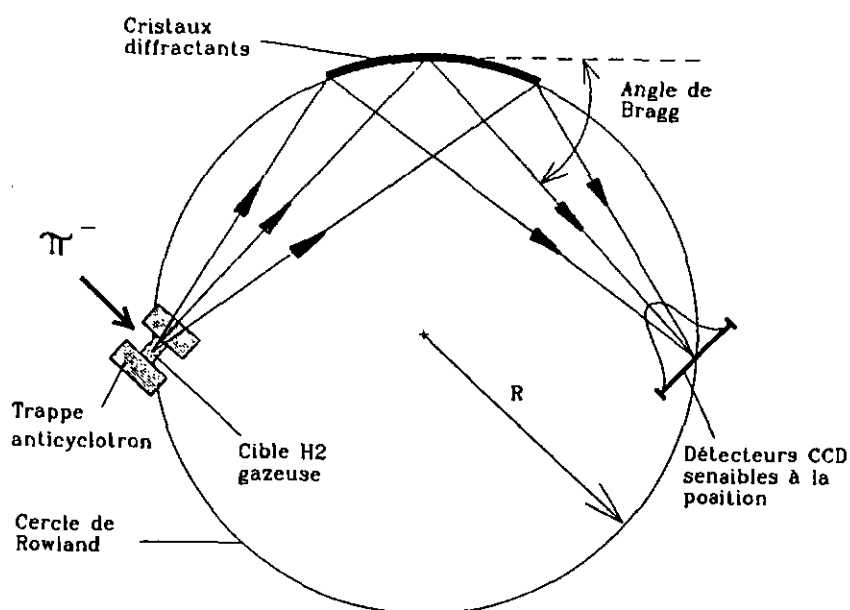


Figure 15: Schéma général du système de mesure.

La cible de production des rayons X, les cristaux diffractants, ainsi que les détecteurs CCD se trouvent sur un cercle appelé cercle de Rowland. Les rayons X émis par la cible sont diffractés et détectés sous l'angle de Bragg.

Les différents éléments de ce système de mesure sont décrits dans les chapitres II, III et IV, les mesures et analyses sont présentées dans le chapitre IV et le chapitre V présentera en conclusion une synthèse de ce travail.

II Spectromètre à cristaux de silicium

II.1 Résumé

II.2 Choix du cristal: quartz ou silicium?

II.3 Diffraction de Bragg sur un réseau cristallin

II.4 Géométrie du spectromètre

II.5 Technique de courbage des cristaux

II.6 Tests à 5.9 keV et 2.6 keV

II.1 Résumé

Dans ce chapitre est décrit de manière détaillée l'instrument que notre équipe a réalisé. Il s'agit d'un spectromètre à diffraction de Bragg à cristaux courbés sphériquement.

Nous discutons d'abord l'aspect théorique de la diffraction de rayons X sur un réseau cristallin. Les formules obtenues permettent de calculer la forme du réflexe d'intensité des rayons X diffractés.

Nous considérons ensuite notre instrument du point de vue géométrique afin d'optimiser la taille, la courbure et la disposition des cristaux, ceci dans le but de réduire les aberrations géométriques qui pourraient dégrader la résolution du spectromètre. Un paragraphe particulier traite de la méthode (délicate) de courbage des cristaux. Finalement, nous présentons les résultats obtenus avec des rayons X de 5.9 keV et 2.6 keV.

II.2 Choix du cristal: quartz ou silicium?

Si le spectromètre à cristaux nous a paru l'instrument le mieux adapté aux exigences de précision et d'efficacité requises par nos mesures, encore restait-il à choisir un cristal permettant de les satisfaire. Parmi le grand nombre de différents cristaux utilisés en spectrométrie de rayons X (voir par exemple [43], page 98), deux types nous ont semblés mieux convenir du point de vue résolution et réflectivité: il s'agit du quartz dans l'orientation $(10\bar{1}\bar{1})$ et du silicium orienté (111) . En outre, ces matériaux peuvent s'obtenir avec une qualité de la structure cristalline proche de la perfection. Leurs caractéristiques à 2434.5 eV sont données dans le tableau ci-dessous à fin de comparaison. La définition des diverses grandeurs reportées est évidente, sauf peut-être celle de la réflectivité intégrale. Cette dernière sera explicitée dans le § II.3.2 ci-dessous.

<i>Cristal</i>	<i>Distance interré- ticulaire d [Å]</i>	<i>Angle de Bragg (1^{er} ordre) θ_B [deg]</i>	<i>Réflec- tivité intégrale R [rad]</i>	<i>Acceptance angulaire Δ [arcsec]</i>	<i>Largeur FWHM Γ [eV]</i>
<i>Quartz</i> $(10\bar{1}\bar{1})$	3.343	49.61	$\sim 12 \cdot 10^{-5}$	~ 46	0.46
<i>Si</i> (111)	3.135	54.31	$\sim 7 \cdot 10^{-5}$	~ 35	0.30

Table 3: Comparaison des caractéristiques des cristaux Qz $(10\bar{1}\bar{1})$ et Si (111) à $E = 2434.5\text{ eV}$.

Nous constatons que les valeurs de réflectivité et résolution sont très proches et si finalement nous avons opté pour le silicium, la raison en est sa très large utilisation dans l'industrie micro-électronique. Du fait de sa très grande diffusion, le silicium peut s'obtenir à prix raisonnable et selon des spécifications géométriques s'adaptant aux particularités de notre utilisation.

Dans le souci d'une description complète de l'instrument que nous avons construit, nous résumons dans les pages qui suivent les principes théoriques de la diffraction de Bragg et exposons les solutions adoptées pour réduire l'influence des facteurs dégradant la résolution.

II.3 Diffraction de Bragg sur un réseau cristallin

Nous résumons dans cette partie les éléments théoriques fondamentaux de la diffraction sur un réseau cristallin. Pour un exposé plus détaillé, le lecteur intéressé pourra consulter les ouvrages de base, en particulier ceux des références [44] à [48].

II.3.1 Loi de Bragg

Rappelons simplement la *loi de Bragg*, issue de la condition générale de diffraction:

$$2d_{hkl} \sin \theta_B = n\lambda \quad (52)$$

avec: d_{hkl} : distance interréticulaire entre les plans d'indices de Miller (hkl);

θ_B : angle d'incidence par rapport aux plans cristallins (angle de Bragg);

λ : longueur d'onde de la radiation incidente;

n : ordre de diffraction.

Cette loi stipule que pour un cristal et une orientation donnés (d_{hkl} fixé), l'intensité mesurée d'une radiation réfléchie de longueur d'onde λ sera non-nulle seulement si la direction d'incidence et la direction d'observation forment chacune un angle θ_B avec les plans réticulaires diffractants.

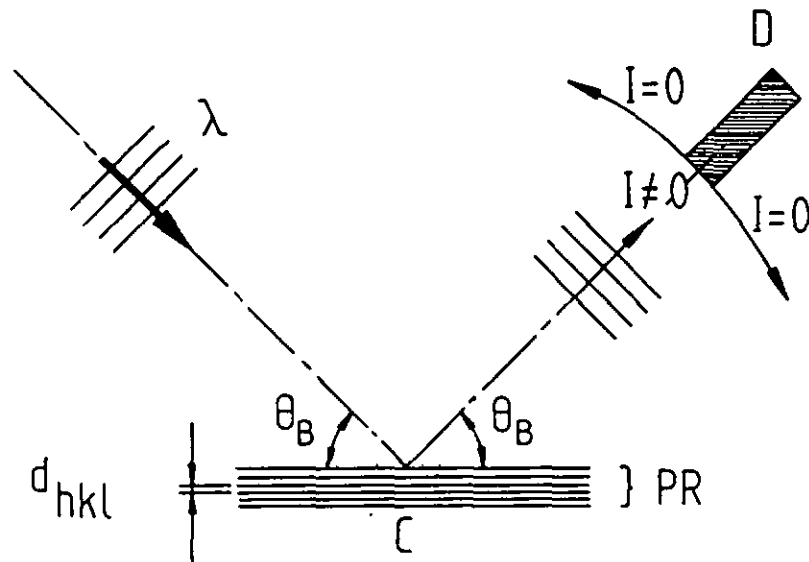


Figure 16: Interprétation de la condition générale de diffraction: loi de Bragg. D= détecteur; C= cristal; PR= plans réticulaires.

II.3.2 Intensité diffractée

Pour des conditions expérimentales déterminées, la formule de Bragg ne donne que l'angle moyen d'observation θ_B . Nous n'avons encore aucune information sur l'intensité diffractée, ni sur la forme de la courbe d'intensité, appelée *réflexe*. La largeur de ce réflexe fournit une information très importante: elle indique la résolution instrumentale ultime atteignable avec le cristal considéré, lorsqu'aucune autre cause ne limite la précision. D'autre part, l'intensité du réflexe est un paramètre déterminant dans le calcul de l'efficacité de l'instrument. La courbe d'intensité peut s'obtenir empiriquement si l'on dispose d'une source étendue de rayons X parfaitement monochromatique. Le principe de mesure est schématisé ci-dessous.

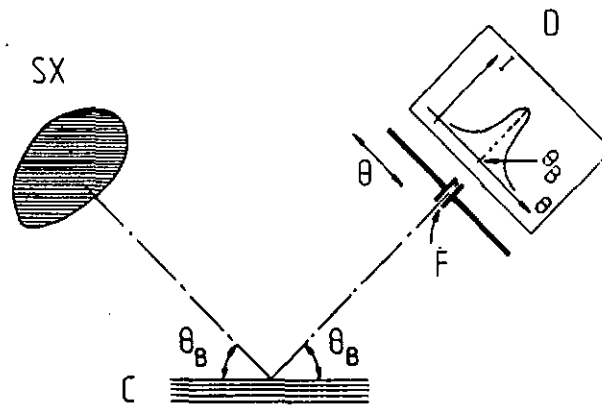


Figure 17: Principe de mesure de la courbe d'intensité diffractée par un cristal. SX = source étendue de rayons X; D = détecteur; F = fente; C = cristal.

En déplaçant la fente devant le détecteur, on mesure l'intensité diffractée en fonction de l'angle θ . Si la largeur de la fente est beaucoup plus petite que la largeur du réflexe mesuré, sa contribution à l'élargissement est négligeable et la courbe mesurée est l'image de la réponse du cristal uniquement. On quantifie la réponse globale du cristal par la *réflectivité intégrale* qui correspond à l'intégrale sous la courbe du réflexe d'intensité diffracté par le cristal. La réflectivité intégrale est donc donnée approximativement par le produit de la réflectivité au pic P (amplitude relative maximale donnée en %) par la largeur à mi-hauteur Γ_{FWHM} (donnée en rad): $R \approx P \cdot \Gamma_{FWHM}$.

Il est aussi possible de calculer la forme du réflexe, ce qui permet de mieux comprendre le phénomène de diffraction cristalline. Dans ce but, considérons un cristal parfait (sans défauts, ni impuretés) formé d'une maille élémentaire dont la translation spatiale répétée selon les trois directions reproduit l'ensemble du réseau cristallin. Cette maille élémentaire contient un certain nombre d'atomes, identiques ou différents, occupant des positions bien définies. La diffusion d'une onde est due essentiellement aux électrons des atomes constituant la maille. En effet, les noyaux étant très petits ($\sim 10^{-16}$ m) et lourds (~ 100 GeV), ils réagissent très faiblement à l'excitation de rayons X de longueur d'onde beaucoup plus grande ($\sim 10^{-10}$ m). On

peut donc considérer que chaque cellule-unité de la structure est remplie par une distribution de matière diffusante donnée par une fonction de concentration (densité) électronique. Seul le cas de la diffusion cohérente ($\lambda = \lambda'$) est abordé ici et, si la source et le détecteur sont suffisamment éloignés du cristal, l'approximation de l'onde plane est justifiée.

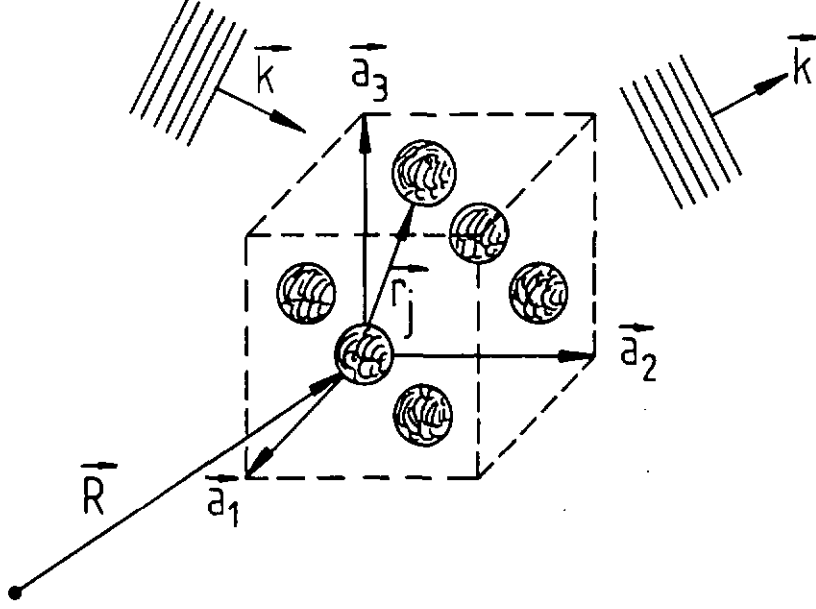


Figure 18: Maille élémentaire diffusant une onde plane. $\vec{k}$, $\vec{k}'$ = vecteurs d'onde; $\vec{R}$ = position maille; $\vec{r}_j$ = position atome j .

On peut montrer que l'intensité totale diffractée par unité de temps s'écrit [44]:

$$I_{tot} \approx I_{el} \cdot A^2 \quad (53)$$

où: I_{tot} est l'intensité totale diffusée par unité de temps;

I_{el} est l'intensité diffusée par un électron;

A est l'amplitude de diffusion totale.

I_{el} est donnée par la formule de Thomson qui l'a calculée à l'aide de l'électrodynamique classique pour la diffusion par un électron libre:

$$I_d = I_0 \cdot r_e^2 \cdot P(2\theta) \quad (54)$$

où: I_0 est l'intensité du faisceau incident ($[I_0] = eV/cm^2/s$);

$r_e = \frac{e^2}{mc^2}$ est le rayon classique de l'électron ($r_e = 2.81794 \cdot 10^{-13} cm$);

$P(2\theta)$ est un facteur de polarisation dépendant de l'angle. Si l'onde est non-polarisée: $P(2\theta) = \frac{1}{2} (1 + \cos^2(2\theta))$.

Quant à l'amplitude de diffusion A , on peut montrer [44] qu'elle s'exprime par le produit:

$$A = F(h, k, l) \cdot G \quad (55)$$

où: $F(h, k, l)$ est le facteur de structure;

G est une somme de facteurs de phase.

Nous verrons ci-dessous que G contient l'effet de la disposition géométrique des mailles élémentaires du cristal, alors que F décrit l'effet de la position relative des atomes dans une maille. Nous verrons aussi que F contient un facteur décrivant l'interaction physique de l'onde avec un atome.

II.3.3 Facteur de phases

G est la somme des facteurs de phase de l'onde qui serait diffusée par un réseau cristallin formé de mailles élémentaires ne contenant qu'un atome ponctuel. Cette somme est donnée par:

$$G = \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{-i\vec{R}(n_1, n_2, n_3) \cdot (\vec{k} - \vec{k}')} \quad (56)$$

où: $\vec{R}(n_1, n_2, n_3)$ repère la maille de coordonnées (n_1, n_2, n_3) ;

$(\vec{k} - \vec{k}')$ est le transfert d'impulsion entre onde incidente et onde diffusée.

Cette fonction G contient donc l'information relative aux déphasages résultant des positions différentes de chaque maille. Elle rend compte des interférences produites par ces déphasages et la loi de Bragg (52) en découle immédiatement (voir réf. [44]): cela revient à exiger que les interférences soient constructives.

Si la maille élémentaire ne contenait qu'un atome ponctuel, alors G donnerait déjà toute l'information nécessaire et nous aurions $A = G$. Dans le cas général, il est nécessaire de moduler cette fonction par une autre contenant l'information sur le contenu de la maille: disposition géométrique des atomes et distribution de la charge électronique diffusante. Cette information est donnée par le facteur de structure que nous examinons ci-dessous.

II.3.4 Facteur de structure

Le facteur de structure est donné par la somme des amplitudes de l'onde diffusée par les s atomes contenus dans la maille élémentaire [44]:

$$F(h, k, l) = \sum_{j=1}^s f_j \cdot e^{-2i\pi[\alpha_j h + \beta_j k + \gamma_j l]} \quad (57)$$

où: $\alpha_j, \beta_j, \gamma_j$ sont les coordonnées de l'atome j dans la maille et h, k, l sont les indices de Miller;

f_j est le facteur de forme, ou facteur de diffusion atomique.

L'exponentielle apparaissant dans $F(h, k, l)$ représente l'information géométrique sur la disposition des atomes dans la maille élémentaire. Du fait des déphasages introduits par les différentes positions des atomes, des interférences apparaissent. $F(h, k, l)$ peut être nul (interférences destructives) pour certains (h, k, l) , ce qui annule A alors que la condition de diffraction serait remplie ($G \neq 0$). Dans ce cas, l'intensité diffractée est nulle pour une certaine orientation même lorsque la loi de Bragg est satisfaite.

Cette particularité permet en retour de caractériser les positions des atomes dans la maille, elle représente une "signature" de la structure géométrique de celle-ci. L'intérêt d'un tel phénomène est évident: il rend possible la détermination expérimentale des structures cristallines et, dans ce but, il est très largement utilisé (voir méthodes de Von Laue et Debye-Scherrer dans les réfs [45] et [46]). Le facteur de structure porte donc bien son appellation.

A part la formule de Thomson (54), nous n'avons considéré jusqu'ici que les effets géométriques résultant de la diffusion d'une onde sur un cristal. La physique de l'interaction n'est pas immédiatement apparente, elle est en fait entièrement contenue dans le facteur de diffusion atomique f_j intervenant dans le facteur de structure $F(h, k, l)$. Il vaut la peine de s'étendre quelque peu sur l'origine et la signification de ce facteur.

II.3.5 Facteur de diffusion atomique

Nous avons déjà mentionné que la diffusion d'une onde incidente sur un cristal était due presque exclusivement aux électrons des atomes constitutifs de la maille élémentaire. Mais les électrons sont concentrés autour des noyaux et, avec une bonne approximation, on peut dire que la diffusion par une cellule-unité est la superposition des diffusions des atomes individuels. Ceci se voit explicitement sur la relation (57).

Supposons que l'amplitude de diffusion pour un atome soit donnée par f -fois celle due à un seul électron classique, dont a donné précédemment le résultat du calcul de Thomson (éq. (54)). On appelle alors f le *facteur de diffusion atomique* ou *facteur de forme*. En multipliant la contribution d'un électron par ce facteur on obtient la contribution de l'atome entier.

Le calcul de f peut être entrepris soit au moyen de l'électrodynamique classique, soit à l'aide de la mécanique quantique. Le lecteur intéressé en trouvera les détails dans la référence [47] (chap. 3). Nous reproduisons ici le résultat du calcul classique effectué sous l'hypothèse suivante: l'énergie de l'onde incidente est beaucoup plus grande que les énergies des raies d'absorption caractéristiques de l'atome, de telle sorte que chaque électron apparaît faiblement lié et diffuse comme un électron libre (formule de Thomson applicable).

Pour un atome donné, le facteur de diffusion atomique s'écrit alors:

$$f = \int_0^\infty U(r) \frac{\sin \mu r}{\mu r} dr \quad (58)$$

où: $\mu = 4\pi \frac{\sin \theta}{\lambda}$;

λ : longueur d'onde des rayons X incidents;

θ : angle de diffusion;

$U(r) = 4\pi r^2 \sum_{i=1}^Z \rho_i(r)$;

$\rho_i(r)$: distribution de probabilité de présence de l'électron i de l'atome.

On peut voir que dans le cas de la diffusion vers l'avant ($\theta = 0$), nous obtenons $f(\theta = 0) = Z$, nombre total d'électrons de l'atome considéré.

Ce résultat est bien celui auquel on s'attend intuitivement, mais il faut préciser que f diminue rapidement lorsque θ augmente, comme nous le verrons ci-dessous pour le silicium. Une discussion détaillée du phénomène est présentée par R. W. James [47].

L'équation (58) n'est valable que sous l'hypothèse faite plus haut qui d'emblée écarte les problèmes de dispersion et d'absorption. Ces effets peuvent être inclus sous forme de corrections au facteur f (voir réf. [47], chap. 3):

$$f = f_0 + f' + if'' \quad (59)$$

où: f_0 : facteur de diffusion atomique, donné par (58);

f' : correction due aux effets de dispersion;

f'' : correction due aux effets d'absorption;

f' et f'' dépendent de la fréquence de l'onde.

A cause de l'absorption, le facteur de forme devient une grandeur complexe. Il est plus facile d'interpréter l'effet des corrections f' et f'' en reliant le facteur f à l'indice de réfraction. En effet, on peut montrer ([47], chap. 3) qu'il existe une relation entre le facteur de forme et l'indice de réfraction n du milieu:

$$n = 1 - \frac{\lambda^2}{2\pi} r_e N F(0) \quad (60)$$

avec: λ : longueur d'onde de la radiation;

$r_e = \frac{e^2}{mc^2}$: rayon classique de l'électron;

N : densité volumique d'atomes;

$F(0)$: facteur de structure correspondant à la diffusion vers l'avant.

Comme f est contenu dans $F(0)$, la correction f'' affecte la partie imaginaire de n — devenu complexe — et est donc responsable de l'absorption par le milieu d'une partie de la radiation. La partie f' , quant à elle, agit sur la partie réelle de n , donc sur la vitesse de phase de l'onde ($v_{phase} = \frac{c}{n}$). Comme n est différent de 1, nous avons un *effet de réfraction* qui a pour conséquence que la loi de Bragg n'est plus exactement vérifiée: l'angle de diffraction θ_B subit une légère correction. Nous verrons l'importance de cette déviation dans la partie consacrée aux calculs pour le silicium.

II.3.6 Théorie de Darwin-Prins

Lorsqu'on cherche à calculer la courbe d'intensité diffractée par un cristal, en admettant que celui-ci soit parfait du point de vue de sa structure, on rencontre essentiellement deux approches de ce problème: la théorie de Darwin [49], modifiée par Prins [50] pour tenir compte de l'absorption, et la *Théorie dynamique* d'Ewald [51]. Cette dernière apparaît peut-être plus élégante, mais elle est aussi plus difficile à comprendre. La théorie de Darwin-Prins est décrite en détail par James ([47], Chap. 2) qui aborde aussi, de façon qualitative, la théorie de Ewald. Cette seconde sert de base à Zachariasen ([48], Chap. 3) pour développer ses calculs. Nous nous bornerons ici à résumer la théorie de Darwin-Prins.

Cette théorie repose sur l'analyse des réflexions multiples de l'onde incidente générées entre les plans successifs du cristal. Elle vise à déterminer l'intensité de l'onde diffusée ou, plus précisément, le *rapport* de l'intensité diffusée sur l'intensité incidente.

On considère pour cela un ensemble de plans cristallins parallèles, repérés par un indice r et espacés par une distance interréticulaire d . Pour chacun de ces plans on note T_r l'amplitude de l'onde incidente et S_r l'amplitude de l'onde réfléchie.

La grandeur qui nous intéresse est le rapport $\frac{S_0}{T_0}$ de l'amplitude rétrodiffusée sur l'amplitude incidente relativement à la surface (plan $r = 0$).

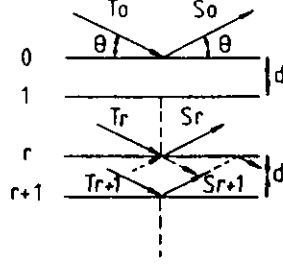


Figure 19: Représentation des amplitudes de réflexion et transmission issues de chaque plan cristallin.

L'idée du calcul est la suivante: pour un plan cristallin donné, par ex. le plan r , l'amplitude T_r transmise sur ce plan résulte de la superposition des amplitudes transmises par les plans supérieurs et la rétrodiffusion sur ces mêmes plans de l'amplitude S_r diffusée par le plan r . D'autre part, l'amplitude S_r que renvoie le plan r est constituée de la partie de T_r rétrodiffusée par ce plan, à laquelle se superpose la contribution provenant des plans inférieurs. On obtient ainsi deux relations permettant de calculer le rapport cherché qui vaut ([47], chap. 2):

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q}{q_0 + v \pm \sqrt{(q_0 + v)^2 - q^2}} \quad (61)$$

où: $v = kd(\sin \theta - \sin \theta_B)$;

$$q = -r_e \cdot \frac{Nd\lambda}{\sin \theta} \cdot F(2\theta);$$

$$q_0 = -r_e \cdot \frac{Nd\lambda}{\sin \theta} \cdot F(0);$$

et: $r_e = \frac{e^2}{mc^2}$: rayon classique de l'électron;

N : nombre d'atomes par unité de volume;

d : distance interréticulaire;

λ : longueur d'onde de la radiation incidente;

θ : angle d'incidence;

$F(0)$ et $F(2\theta)$: facteur de structure correspondant à la diffusion vers l'avant ($\theta = 0$) et à la rétrodiffusion (2θ).

Les facteurs q et q_0 sont liés aux coefficients de réflexion et transmission respectivement. Le facteur v tient compte du déphasage ($kd \sin \theta$) introduit par la distance ($d \sin \theta$) à parcourir entre deux plans successifs. Lorsque l'angle d'incidence est égal à l'angle de Bragg, on a $v = 0$.

La relation (61) ne tient pas compte de l'absorption. Ce serait le résultat correct pour un cristal parfait non absorbant, mais ne peut convenir à notre situation où, du fait de la basse énergie des rayons X mesurés, l'absorption est importante. Pour en tenir compte, J.A. Prins [50] a eu l'idée de considérer les coefficients q_0 et q comme des grandeurs complexes, ce qui équivaut formellement à introduire une absorption. Ces coefficients sont modifiés de la manière suivante:

$$\begin{aligned} q &= -\frac{kd}{\sin \theta} (A + iB) \\ q_0 &= -\frac{kd}{\sin \theta} (\delta + i\beta) \end{aligned} \quad (62)$$

$$\text{où: } A = \frac{\lambda^2}{2\pi} r_e N \cdot \Re\{F(2\theta)\};$$

$$B = \frac{\lambda^2}{2\pi} r_e N \cdot \Im\{F(2\theta)\};$$

$$\delta = \frac{\lambda^2}{2\pi} r_e N \cdot \Re\{F(0)\};$$

$$\beta = \frac{\lambda^2}{2\pi} r_e N \cdot \Im\{F(0)\} = \frac{\lambda\mu_0}{4\pi}.$$

Remarquons que μ_0 correspond au coefficient d'absorption habituel, caractéristique de l'atténuation des rayons X dans la matière.

En introduisant la variable "déviations à l'angle de Bragg" $\Delta\theta = \theta - \theta_B$, limitée par définition à de petites valeurs comparativement à θ_B , nous pouvons faire l'approximation: $\sin \theta - \sin \theta_B \cong \cos \theta_B \cdot \Delta\theta$.

Avec cette relation, le facteur v de (61) peut s'écrire:

$$v = kd \cos \theta_B \cdot \Delta\theta. \quad (63)$$

En remplaçant q_0 , q et v dans l'équation (61) par les expressions (62) et (63), nous obtenons finalement:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{A + iB}{C \pm \sqrt{C^2 - (A + iB)^2}} \quad (64)$$

avec:

$$C = \cos \theta_B \sin \theta_B \cdot \Delta\theta - \delta - i\beta.$$

Pour obtenir le rapport de l'intensité diffusée sur l'intensité incidente il suffit d'élever au carré le rapport des amplitudes:

$$\frac{I(\theta)}{I_0} = \left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2. \quad (65)$$

Le choix du signe devant la racine de (64) est imposé par la conservation d'énergie: il faut que $\left| \frac{S_n}{T_0} \right|^2 \leq 1$. Les résultats et les courbes correspondant au cristal de silicium seront présentés ci-après.

II.3.7 Extinction primaire et extinction secondaire

Suite à l'analyse précédente, on peut se poser la question de savoir quel est le nombre de plans cristallins — la "profondeur de pénétration" — qui interviennent effectivement dans le phénomène de diffraction. En effet, même lorsque le coefficient d'absorption ordinaire μ_0 est supposé négligeable, on constate que lorsque l'angle d'incidence correspond à l'angle de Bragg, la quasi-totalité de l'énergie incidente se retrouve dans l'onde diffractée. L'intensité du faisceau transmis dans le cristal diminue très rapidement, comme si l'absorption était très importante.

Ceci s'explique par le fait que l'onde se propageant dans le cristal interfère avec ses propres réflexions multiples qui se déplacent dans la même direction, mais déphasées. Lorsque l'angle d'incidence correspond à l'angle de Bragg, on peut montrer que ces interférences deviennent destructives. D'où l'atténuation rapide de l'intensité transmise.

L'atténuation peut s'exprimer par un facteur exponentiel donné par e^{-p/p_0} , où p est le nombre de plans traversés et p_0 est le nombre de plans correspondant à une atténuation de $1/e$. Ce coefficient p_0 est donné au premier ordre de diffraction par (voir [47], chap. 2):

$$p_0 = \frac{1}{\pi d^2 r_e N |F(0)|} \quad (66)$$

où les symboles utilisés ont été définis précédemment.

Cet effet d'atténuation, dû à des interférences destructives, a été baptisé par Darwin *Extinction primaire*. Il s'applique à des cristaux parfaits sans absorption.

Dans le cas où le cristal n'est pas parfait — on parle alors de cristal "mosaïque" — il apparaît un autre effet d'atténuation, dénommé par Darwin *Extinction secondaire*, résultant d'un processus différent de celui de l'absorption ordinaire. Il est dû au fait qu'un cristal "mosaïque" est constitué d'une multitude de microcristaux qui peuvent être considérés parfaits s'ils sont pris isolément. Mais bien que les plans d'un microcristal à l'autre soient pratiquement parallèles, il n'y a pas de corrélation spatiale précise entre les différents microcristaux. Il résulte des réflexions successives entre ces nombreuses "petites briques" une diminution de l'intensité du faisceau transmis. Apparemment semblable à l'effet d'extinction primaire, celui-ci en est profondément différent dans le sens que dans ce dernier cas l'atténuation est due à une diffusion incohérente, alors que pour le premier il s'agit d'interférences destructives.

L'effet global d'atténuation dans le cas de l'extinction secondaire est semblable à celui de l'absorption ordinaire et peut être introduit sous forme de coefficient μ s'ajoutant à μ_0 pour former un coefficient d'absorption effectif. On trouvera dans la référence [47] (chap. 3) une discussion détaillée, ainsi que des données numériques

concernant cet effet.

Dans notre cas, la perfection cristalline du silicium rend négligeable l'extinction secondaire. Nous n'aurons à considérer que l'extinction primaire (66) et l'absorption ordinaire donnée par le coefficient μ_0 pour lequel le nombre p_μ de plans traversés correspondant à 1 longueur d'atténuation est donné par:

$$p_\mu = \frac{\sin \theta}{\mu_0 d} \quad (67)$$

où les symboles sont ceux définis plus haut.

Les formules (66) et (67) nous permettront de comparer l'importance des deux effets d'atténuation.

II.3.8 Influence de la température

Nous avons ignoré jusqu'ici le fait que les atomes sont soumis à l'agitation thermique. L'hypothèse faite en considérant que les atomes occupaient une position fixée précisément n'est pas vérifiée car la température n'est pas nulle. Ces atomes oscillent légèrement autour de leur position d'équilibre de manière complètement désordonnée. Cela a pour effet qu'une partie de la diffusion a lieu de façon incohérente, produisant un fond continu sous la courbe d'intensité, qui elle résulte de la diffusion cohérente. L'effet global de l'agitation thermique est une diminution de l'amplitude de la courbe d'intensité. Cette atténuation est donnée par le facteur de Debye-Waller:

$$D = e^{-2M}. \quad (68)$$

Une analyse approfondie de cet effet de température, ainsi que le calcul analytique de l'exposant M est présenté par A. Guinier ([45], chap. 13). Notons simplement que M dépend de l'angle de diffraction, qu'il augmente si θ augmente et vaut 0 si $\theta = 0$.

Si nous considérons une température du cristal *variable*, nous aurons en plus un effet de dilatation du réseau cristallin qui modifie la distance interréticulaire d_{hkl} et change l'angle de Bragg. Il est facile d'estimer l'influence sur θ_B d'une variation ΔT de température au moyen de la loi de Bragg.

En effet, la variation Δd résultant du changement ΔT de température est donnée par:

$$\Delta d = d \cdot \alpha \cdot \Delta T \quad (69)$$

où α est le coefficient de dilatation thermique linéique.

De la loi de Bragg on tire la variation $\Delta \theta$ de l'angle θ_B produite par une variation Δd de la distance interréticulaire:

$$\frac{\Delta d}{d} = -\frac{\Delta \theta}{\tan \theta_B}. \quad (70)$$

Comme d'autre part

$$\frac{\Delta\theta}{\tan\theta_B} = -\frac{\Delta E}{E}, \quad (71)$$

on obtient finalement les relations

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\theta}{\Delta T} &= -\tan\theta \cdot \alpha \\ \frac{\Delta E}{\Delta T} &= E \cdot \alpha \end{aligned} \quad (72)$$

qui nous permettront d'estimer les effets de la variation de température.

II.3.9 Détermination des caractéristiques pour Si(111)

Facteur de structure pour les indices (1,1,1)

La formule (57) permet de calculer le facteur de structure si l'on connaît la position des atomes dans la maille élémentaire. Le silicium monocristallin possède la structure du diamant; la maille élémentaire contient donc 8 atomes disposés selon les coordonnées $(\alpha_j, \beta_j, \gamma_j)$ suivantes:

$$\begin{array}{cccc} (0, 0, 0) & (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) & (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) & (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) \\ (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) & (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) & (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}) & (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}) \end{array}$$

Table 4: Coordonnées des atomes de la maille élémentaire de Si (111).

L'unité des ces coordonnées est la longueur de l'arête du cube contenant la maille élémentaire (5.428 Å), le premier atome formant l'origine. Pour les indices de Miller ($h = 1, k = 1, l = 1$) et un facteur de forme identique pour tous les atomes, le facteur de structure vaut:

$$F(1, 1, 1) = f_{Si} \cdot 4(1 + i).$$

Il est intéressant de comparer les valeurs de ce facteur pour les 2^e et 3^e ordres de diffraction: $F(2, 2, 2) = 0$ (!) et $F(3, 3, 3) = f_{Si} \cdot 4(1 - i)$.

Nous constatons que le facteur de structure s'annule au 2^e ordre. L'intensité mesurée serait donc nulle dans ce cas. Par contre, au 3^e ordre ce facteur est, en valeur absolue, le même que pour le 1^{er} ordre. La mesure serait donc possible.

Facteur de diffusion atomique

Ce facteur est donné par la relation (60), la formule (58) donnant f_0 . Les auteurs de la référence [52] ont calculé une approximation analytique permettant de tracer les courbes suivantes, caractéristiques du comportement de f_0 .

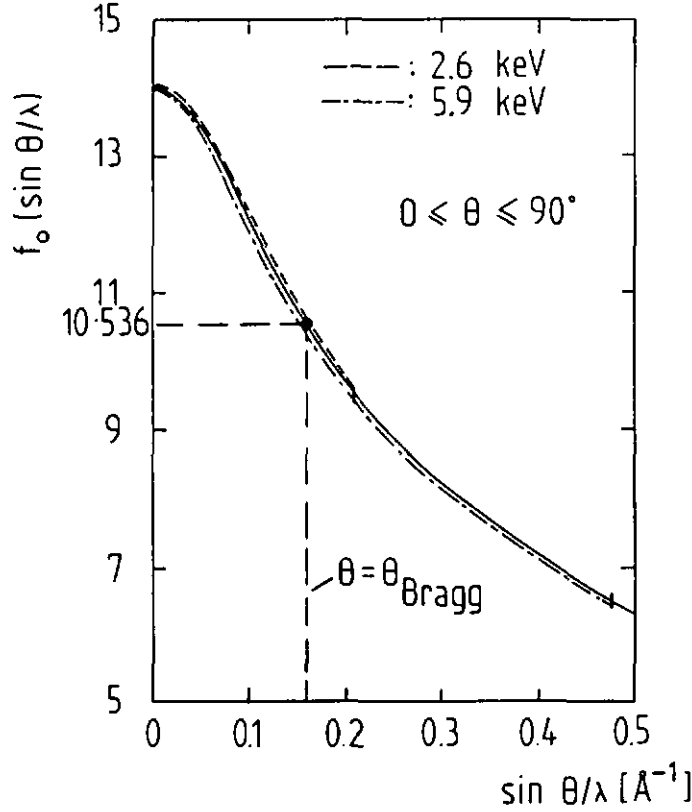


Figure 20: Facteur de diffusion atomique f_0 en fonction de $(\frac{\sin \theta}{\lambda})$ pour 2.6 keV et 5.9 keV.

Dans le cas où l'onde diffuse sous l'angle de Bragg, nous obtenons, indépendamment de l'énergie, $f_0(\frac{\sin \theta_B}{\lambda} = \frac{1}{2d}) = 10.536$.

Nous remarquons que f_0 augmente si θ diminue. Mais si on s'éloigne de la condition de diffraction ($\theta = \theta_B$), l'intensité diffractée diminue beaucoup plus rapidement que n'augmente f_0 , comme nous le verrons ci-dessous. Cette légère variation de f_0 n'influant pratiquement pas sur le réflexe d'intensité, on considère f_0 constant.

Les corrections f' et f'' intervenant dans (60) sont dues essentiellement aux électrons de la couche K des atomes, comme l'explique James [47]. Ce dernier propose en outre des formules approximées permettant de calculer ces corrections. D'autres chercheurs — Cromer et Libermann [53] — ont écrit un programme d'ordinateur à partir des résultats de calculs relativistes donnant f' et f'' précisément. Malheureusement le domaine d'énergie qu'ils ont considéré ne s'étend qu'entre 5 keV et 20 keV, le programme donnant des résultats erronés en dehors de ce domaine.

Nous trouvons encore dans la référence [54] des valeurs de f'' pour les basses énergies qui nous intéressent. Celles-ci nous serviront à comparer les valeurs calculées à partir des relations de la réf. [47].

Ces données sont rassemblées dans le tableau-résumé apparaissant plus loin.

Facteur de Debye-Waller

Ce facteur dépend bien évidemment de la température, mais aussi d'un paramètre appelé *Température de Debye* caractérisant la "rigidité" des liaisons interatomiques du matériau considéré. Pour être complet, nous devons préciser qu'il existe aussi une dépendance dans l'angle de diffusion, mais comme θ varie très peu, nous fixons $\theta = \theta_B$.

La relation permettant de calculer l'exposant M de (68) est donnée dans la référence [45]. La température de Debye du Si pour une température du matériau de 296 K vaut, selon [55], $\Theta_{Debye} = 533 K$. Nous calculons ainsi : $M = 1.169 \cdot 10^{-2}$ et $D = e^{-2M} = 0.977$ pour le facteur de Debye-Waller.

La perte d'intensité due à l'agitation thermique n'est donc que de 2.3 %, on la négligera.

Dilatation thermique

Le coefficient de dilatation linéique pour le silicium vaut environ $\alpha \cong 2 \cdot 10^{-5} K^{-1}$. A l'aide des relations (72) on calcule les variations d'angle de Bragg et d'énergie correspondant à diverses raies X. Ces corrections figurent dans le tableau-résumé. On constate qu'elles valent environ 0.06 eV/K ($-3.7''/K$) dans le domaine qui nous concerne (3 keV).

Si la variation de la température des cristaux est inférieure à 0.1 K, comme c'est le cas pour notre spectromètre stabilisé en température, nous avons

$$\Delta E < 6 \cdot 10^{-3} \text{ eV ,}$$

ce qui rend cette correction négligeable.

Extinctions primaire et secondaire

Les profondeurs de pénétration calculées à partir des relations (66) et (67) pour chacun des cas sont reportées dans le tableau-résumé qui suit.

Courbes d'intensité diffractée

Nous avons calculé ces courbes d'intensité au moyen des équations (64) et (65). Dans le but de vérifier nos calculs, nous les avons repris avec une relation différente donnée par S.Kikuta [56] qui se base sur celle de Hirsch et Ramachandran [57], elle-même issue de la théorie dynamique d'Ewald présentée par Zachariasen [48].

S.W. Wilkins relève dans la réf. [58] qu'une approximation inutile faite par Zachariassen peut conduire à des erreurs dans le cas du "cristal mince". A nos basses énergies, un cristal de quelques dizaines de microns apparaît déjà très épais; cette remarque ne nous concerne donc pas.

Nous n'avons constaté aucune différence significative entre les résultats provenant des deux relations, ce qui n'étonne guère dès lors que F. Miller a montré par un calcul astucieux qu'elles étaient équivalentes (cf. réf. [59]).

Les courbes obtenues pour différentes raies X sont représentées ci-dessous. C'est à partir de celles-ci que nous avons déterminé les valeurs de la réflectivité au pic, la largeur à mi-hauteur (*FWHM*) et la réflectivité intégrale reportées dans le tableau-résumé.

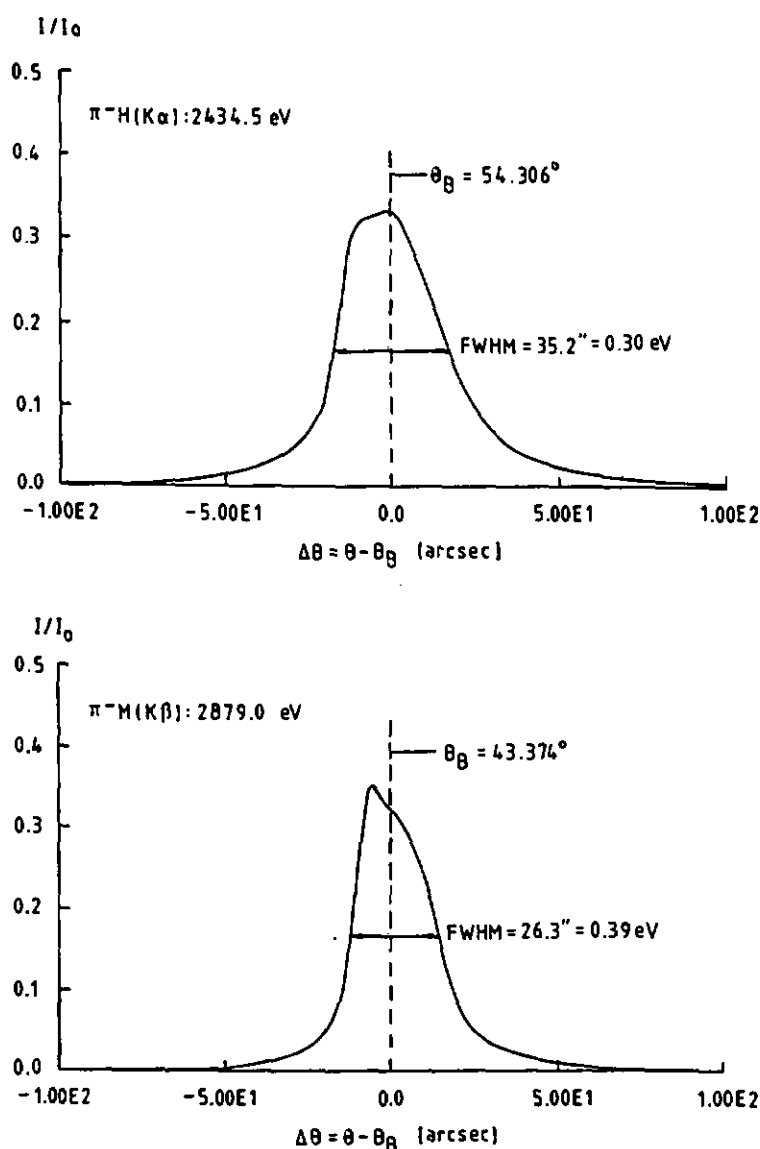


Figure 21: Courbes théoriques d'intensité diffractée par $\text{Si}(111)$ pour $\pi^-H(K\alpha)$ et $\pi^-H(K\beta)$.

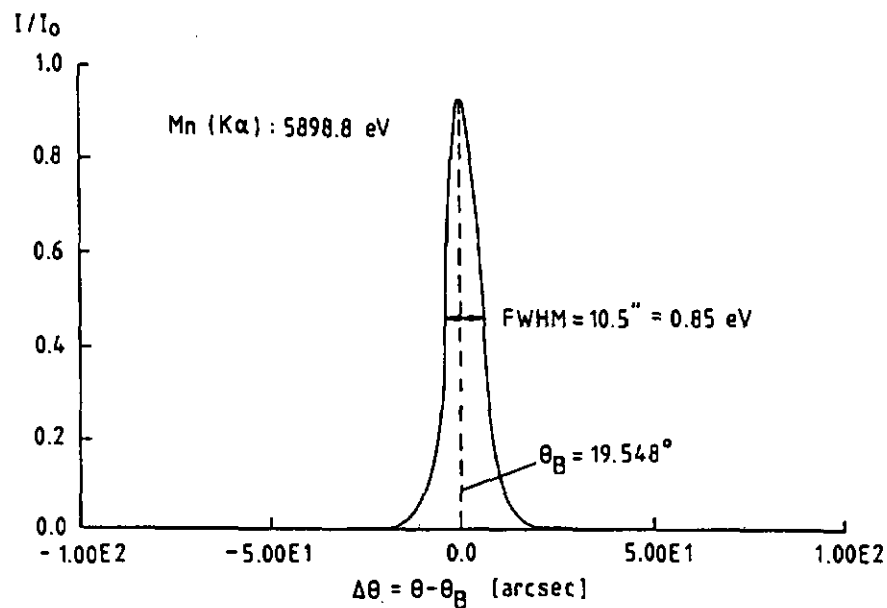
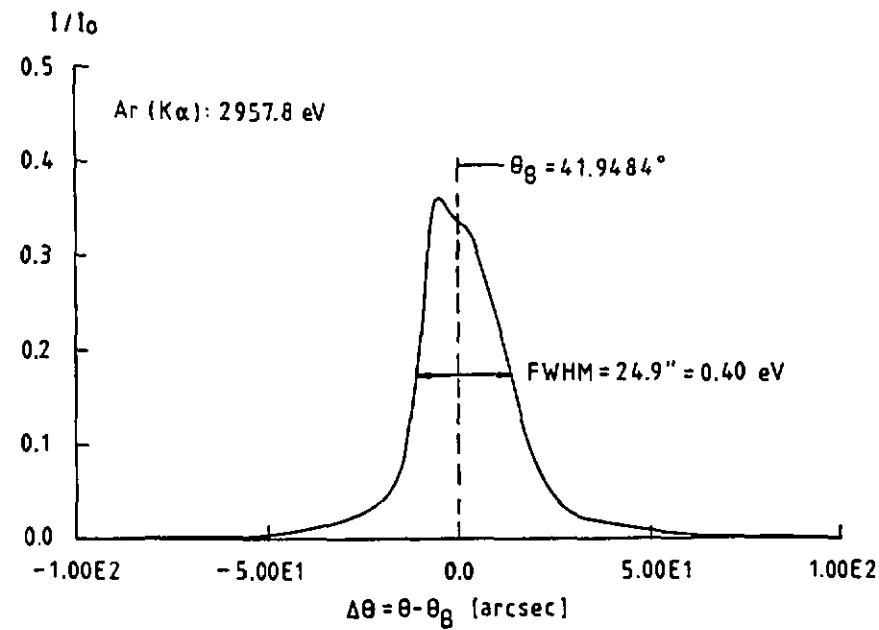


Figure 22: Courbes théoriques d'intensité diffractée par Si(111) pour Ar(K_α) et Mn(K_α).

Nous constatons que plus l'énergie augmente et plus le pic "rétrécit", alors que son amplitude s'accroît. Ce phénomène, caractéristique des processus de diffraction, s'explique en constatant que si l'énergie augmente, un nombre croissant de plans cristallins participent à la reconstruction de l'onde diffractée, ce qui "concentre" l'intensité dans un domaine angulaire plus étroit.

II.3.10 Tableau-résumé des caractéristiques pour Si(111)

<i>Raies X</i>	$\pi^-H(K_\alpha)$	$Cl(K_\alpha)$	$\pi^-H(K_\beta)$	$Ar(K_{\alpha_1})$	$Mn(K_\alpha)$
<i>Energie [eV]</i>	2434.5	2622.4	2879.0	2957.8	5898.8
$\lambda [Å]$	5.0928	4.7279	4.3065	4.1918	2.1019
$\theta_B [deg]$	54.306	48.934	43.374	41.9484	19.584
<i>Facteur $f_0(\theta_B)$</i>	10.536	10.536	10.536	10.536	10.536
<i>Correction f'</i>	$-5.33 \cdot 10^{-1}$	$-2.37 \cdot 10^{-1}$	$1.01 \cdot 10^{-2}$	$6.30 \cdot 10^{-2}$	$3.34 \cdot 10^{-1}$
<i>Correction f''</i>	2.74	2.40	2.06	1.94	0.59
<i>Fact. Debye – Waller</i>	0.977	0.977	0.977	0.977	0.977
<i>Corr. dilat. therm.</i> [arcsec/K] ([eV/K])	-5.7 (0.05)	-4.7 (0.05)	-3.9 (0.06)	-3.7 (0.06)	-1.5 (0.12)
$\mu/\rho \left[\frac{cm^2}{g} \right]$	1735	1400	1075	1000	154
<i>Long. d'abs. $1/\mu_0$</i> [μm] ([nb de plans])	2.47 (6400)	3.07 (7380)	3.99 (8740)	4.29 (9150)	27.7 (29600)
<i>Ext. primaire</i> [μm] ([nb de plans])	0.86 (2220)	0.90 (2170)	0.98 (2140)	1.00 (2130)	1.97 (2110)
<i>Réflec. au pic [%]</i>	32	31	33	35	83
<i>FWHM [arcsec] ([eV])</i>	35.2 (0.30)	30.6 (0.34)	26.3 (0.39)	24.9 (0.40)	10.5 (0.85)
<i>Réflec. int. [rad]</i>	$6.9 \cdot 10^{-5}$	$5.7 \cdot 10^{-5}$	$5.0 \cdot 10^{-5}$	$5.0 \cdot 10^{-5}$	$4.7 \cdot 10^{-5}$
<i>Déviation</i> à θ_B [arcsec]	1.3	1.7	1.9	2.0	1.3

Table 5: Caractéristiques pour Si (111) à diverses énergies.

II.4 Géométrie du spectromètre

Les spectromètres à rayons X basés sur la diffraction de Bragg sur un réseau cristallin peuvent se présenter sous diverses configurations géométriques. Dans tous les cas la mesure consiste à déterminer l'angle de Bragg, angle sous lequel sont diffractés les rayons X dont la longueur d'onde satisfait la relation de Bragg (52). La figure ci-dessous illustre les méthodes de mesure correspondant à trois configurations géométriques fréquemment rencontrées pour ce type d'instrument.

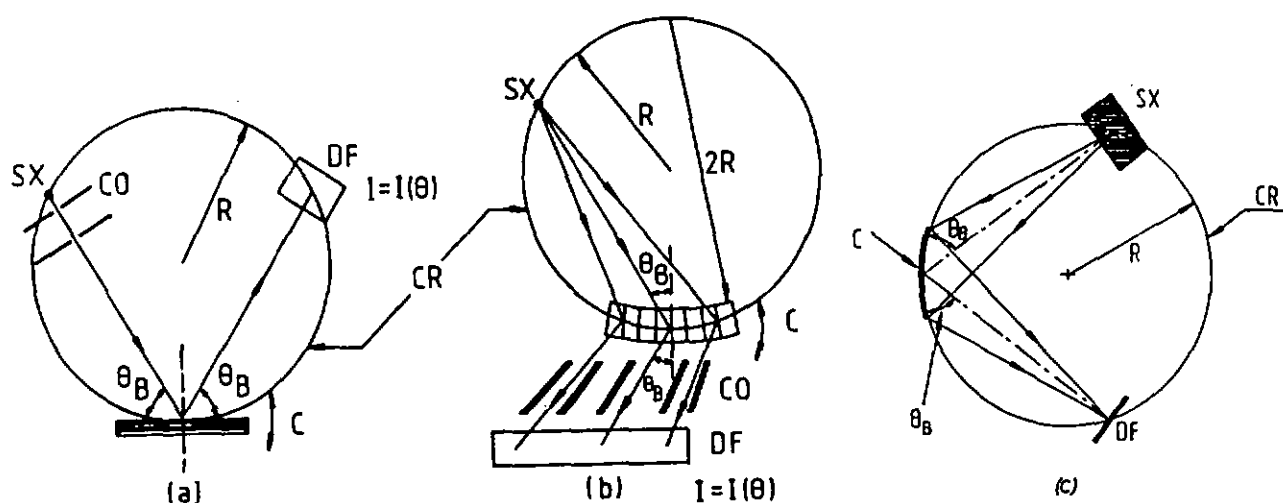


Figure 23: Trois méthodes de mesure. SX= source X; C= cristal; DF= détecteur fixe; CR= cercle de Rowland; R= rayon de CR; θ_B = angle de Bragg; CO= collimateur.

Les trois principes illustrés sont les suivants:

- (a) Mesure en *réflexion* avec un cristal *plat orientable*.
- (b) Mesure en *transmission* avec un cristal *courbé orientable*.
- (c) Mesure en *réflexion* avec un cristal *courbé fixe*.

Dans les trois cas le cercle de Rowland passe par les centres du cristal, de la source et du détecteur. La détermination précise de l'angle de Bragg nous permet d'en déduire l'énergie des rayons X émis par la source.

La méthode (a), en réflexion, nécessite une source ponctuelle et des fentes de collimation qui fixent précisément la direction d'émission des rayons X. Le cristal diffractant est plat et orientable, de telle sorte qu'en le faisant tourner autour de son axe vertical (orthogonal au plan du cercle) il couvre le domaine angulaire sur lequel sont dispersés les rayons X. Le relevé de l'intensité mesurée par le détecteur en fonction de la position angulaire du cristal permet de reconstituer le réflexe. Cette méthode présente le désavantage de nécessiter des fentes de collimation qui réduisent notablement l'intensité émise.

La géométrie (b) correspond à un spectromètre fonctionnant en transmission. La source X est supposée ponctuelle et le cristal (mince) est courbé selon le rayon $2R$. Grâce à cette courbure, lorsque la condition de Bragg est satisfaite pour un plan cristallin, elle l'est simultanément pour tous les plans (si le cristal n'est pas trop étendu). Il est donc inutile de fixer la direction d'émission mécaniquement. Le collimateur a pour unique fonction de réduire le bruit de fond en absorbant les radiations parasites. Comme précédemment, la mesure du réflexe d'intensité s'effectue par rotation du cristal.

La mesure en transmission est défavorable à basse énergie (2–3 keV) car les rayons X sont rapidement absorbés par le cristal, même si son épaisseur est faible.

La troisième méthode, (c), est basée sur la réflexion des rayons X sur un cristal courbé de telle manière que la condition de Bragg soit satisfaite pour chaque point du cristal simultanément. Nous verrons ci-dessous comment doit être cette courbure. La source X est ici étendue, la justification en sera donnée plus loin. La mesure du réflexe est effectuée au moyen d'un détecteur fixe, sensible à la position, et dont la résolution spatiale est bien supérieure (10 à 20 fois) à la largeur du réflexe.

Cette géométrie présente l'avantage de focaliser les rayons X sur le détecteur, augmentant ainsi l'intensité mesurée. Cette propriété peut s'avérer déterminante dans le choix de la géométrie lorsqu'il s'agit, comme dans notre cas, de trouver un moyen de pallier un faible taux de comptage. En outre, le désavantage qui affecte les deux autres méthodes — perte d'intensité par collimation ou absorption dans le cristal — est ici absent.

Finalement, la méthode (c) ne nécessite aucune partie mobile lors de la mesure, ce qui simplifie la réalisation mécanique et permet d'assurer une meilleure précision de l'ensemble. Ces avantages nous ont conduit à choisir cette dernière configuration pour la réalisation de notre spectromètre.

II.4.1 Focalisation des rayons X

Cas idéal

Le cas de la focalisation idéale est décrit par D.W. Berreiman [60], nous le résumons ici. Pour obtenir une focalisation dans le plan "vertical" — normal au cercle de Rowland — passant par la source et le détecteur, il faut que les plans cristallins

soient courbés selon des cylindres elliptiques dont les points focaux se confondent avec les centres de la source et du détecteur. La position et l'orientation des plans cristallins sont alors telles que la loi de Bragg est satisfaite simultanément pour tous les points de chaque plan. Cette disposition particulière est représentée ci-dessous.

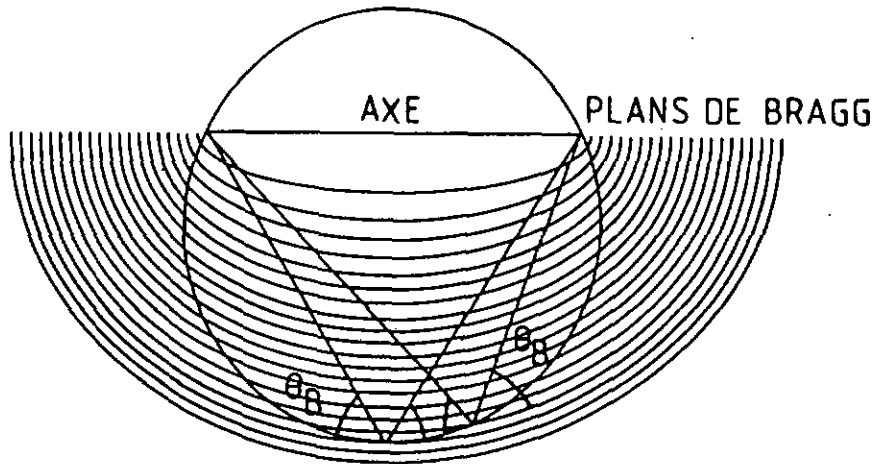


Figure 24: Coupe transversale de la géométrie idéale donnant une focalisation "ligne-à-ligne".

Si nous donnons une courbure additionnelle aux plans autour de l'axe passant par la source et le détecteur, nous obtenons une focalisation supplémentaire dans le plan du cercle de Rowland. Les plans sont alors courbés selon des ellipsoïdes et la focalisation devient "ponctuelle": l'image d'un point de la source est un point sur le détecteur. C'est ce que nous appellerons le *cas idéal*.

Nécessité d'une source étendue

La nécessité d'une source étendue provient de ce que l'acceptance du cristal sur la source n'est pas strictement ponctuelle, même avec une géométrie idéale. En effet, dans le paragraphe précédent (fig. 21) on a vu que pour une raie monochromatique le réflexe d'intensité n'est pas une ligne à l'angle de Bragg, mais à une courbe assimilable à une lorentzienne possédant une certaine largeur. Il faut donc que la source soit en tous cas plus étendue que la largeur du réflexe, sans quoi nous mesurerions l'image de la source et non celle du réflexe.

Approximation du cas idéal

La réalisation pratique de la géométrie idéale avec du silicium cristallin pose des problèmes, sinon insurmontables, du moins extrêmement difficiles à résoudre. Il est par contre possible de l'approximer d'excellente façon si le rayon du cercle de Rowland est beaucoup plus grand que la taille du cristal diffractant (ordre de grandeur: 20 à 100 fois).

La méthode consiste à courber cylindriquement le cristal selon le double du rayon du cercle de Rowland et de le placer tangentiellement à celui-ci. Cette disposition est montrée dans la figure suivante où, pour des raisons de clareté, la taille du cristal ne respecte pas l'échelle.

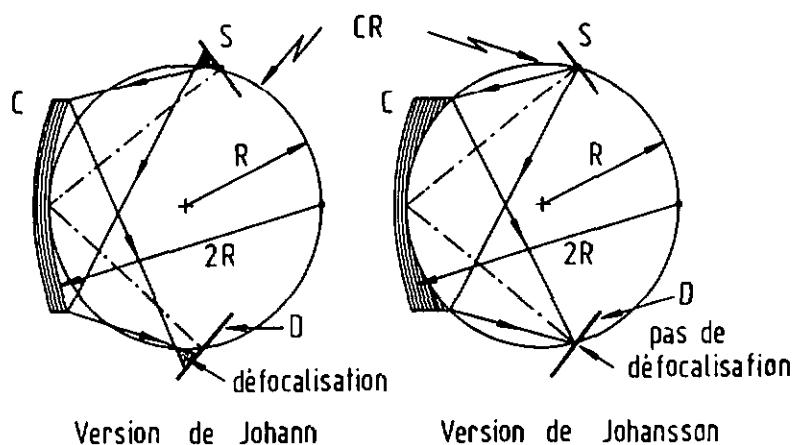


Figure 25: Schéma de principe des spectromètres de Johann et de Johansson.

Cette géométrie, que nous convenons d'appeler *géométrie de Johann* (cf. réf. [61]), est très bien adaptée au voisinage du centre du cristal mais ne l'est plus dès que l'on s'en écarte. Les plans cristallins s'éloignent alors du cercle de Rowland, produisant une défocalisation proportionnelle au carré de la distance au centre. T. Johansson [62] a supprimé ce défaut en creusant la surface du cristal selon le rayon R du cercle de Rowland, après l'avoir courbé selon le rayon $2R$ (voir fig. 25). De cette manière, la surface du cristal reste constamment sur le cercle de Rowland et les plans sont bien courbés selon le rayon $2R$.

Remarquons toutefois que dans aucune des versions de Johann ou de Johansson le cristal n'est courbé verticalement. La focalisation obtenue est donc du type "ligne-à-ligne".

Plusieurs méthodes de courbage des cristaux existent et sont décrites par différents auteurs. Le lecteur intéressé pourra consulter les références [60], [63] et [64]. Nous exposerons plus loin dans ce chapitre le détail de celle que nous avons retenue pour la réalisation de notre spectromètre.

Dans notre cas, l'état de surface du cristal de silicium est déterminant puisque ce sont les plans proches de la surface qui contribuent à la diffraction. Or, s'il est possible d'obtenir des états de surface presque parfaits du point de vue cristallin par des moyens mécano-chimiques, il apparaît extrêmement difficile, voire impossible, de retoucher sa courbure mécaniquement sans dégrader cette surface. D'autre part, comme déjà mentionné, la géométrie de Johann produit une défocalisation horizontale. Mais nous verrons qu'en limitant la taille du cristal, cette aberration peut être maintenue dans des limites acceptables.

Nous avons donc opté pour un compromis entre la géométrie de Johann et celle de Johansson: nous avons approximé la géométrie de Johansson en remplaçant un cristal unique par la juxtaposition de plusieurs cristaux de type Johann de taille réduite. La diminution de l'angle solide due à la diminution de taille des cristaux est compensée par le nombre de ces cristaux.

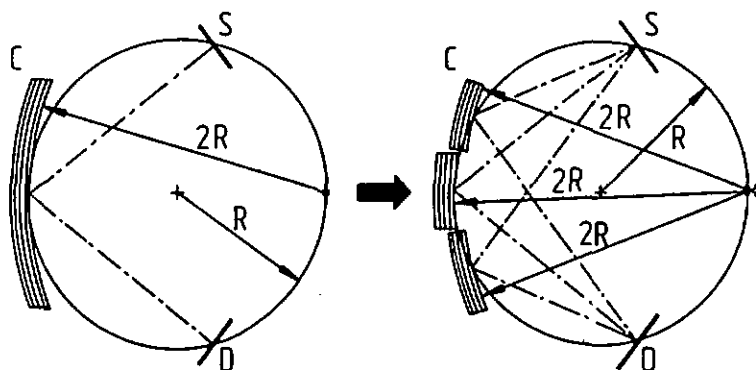


Figure 26: La juxtaposition de plusieurs cristaux plutôt qu'un seul permet de diminuer la défocalisation horizontale inhérente à la géométrie de Johann.

Les calculs des aberrations géométriques qui suivent (§ II.4.2) montreront que cette disposition particulière permet effectivement de limiter la défocalisation horizontale.

Pour obtenir une focalisation supplémentaire dans le plan vertical, nous avons modifié la géométrie de Johann-Johansson en courbant les cristaux sphériquement plutôt que cylindriquement. Dans une situation idéale, le rayon de courbure vertical devrait être différent du rayon de courbure horizontal. Mais la difficulté de réalisation d'une courbure toroïdale très précise nous a conduit à l'approximation de la courbure sphérique, au prix d'une défocalisation verticale. L'ordre de grandeur de cette défocalisation est aussi calculé ci-dessous.

II.4.2 Calcul des aberrations géométriques

Dans le but de mieux comprendre l'origine et l'importance des aberrations géométriques, nous avons décomposé cette étude en plusieurs étapes, partant d'un cas simplifié à l'extrême pour aboutir à la conception finale de notre spectromètre.

Comme précédemment, le terme *plan horizontal* se réfère au plan contenant le cercle de Rowland et nous désignons par *verticals* les plans et droites qui lui sont orthogonaux.

Estimation des aberrations horizontales

Nous considérons ici le cas simple d'un cristal unidimensionnel, courbé dans le plan horizontal selon un rayon $2R$, R étant le rayon du cercle de Rowland. L'angle de Bragg est désigné par θ . Ce cristal occupe la position X_c , repérée depuis la position centrale C_0 , comme le représente la figure ci-dessous.

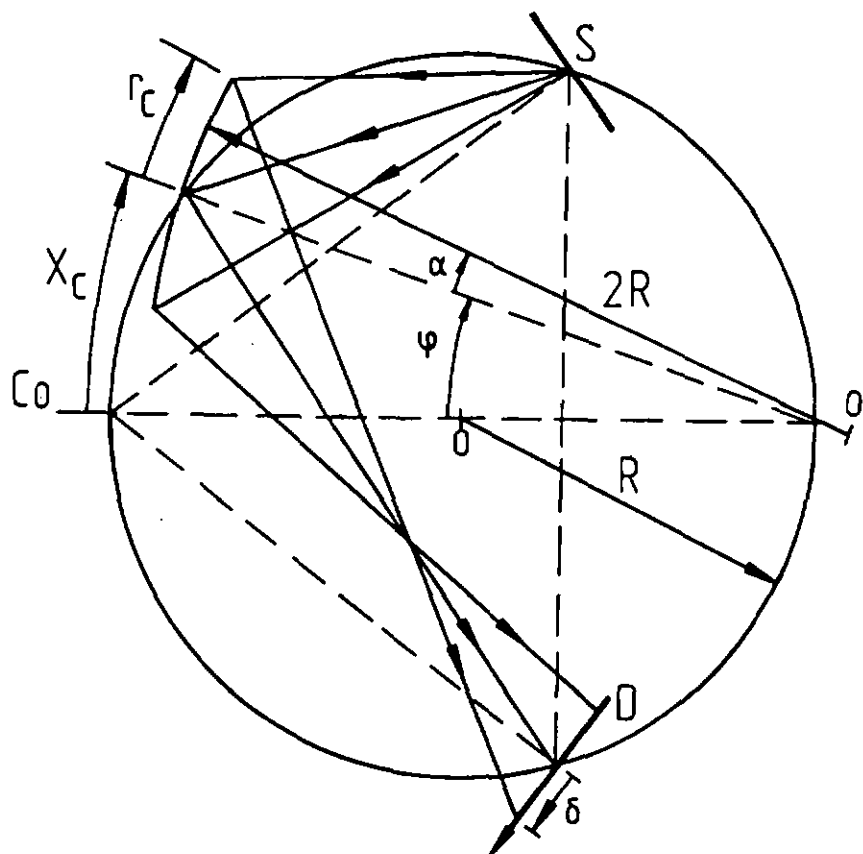


Figure 27: Schéma simplifié pour le calcul des aberrations horizontales (échelle non respectée).

Un point sur le cristal est repéré par r_c , mesuré à partir de la position X_c . Le sens positif pour X_c et r_c correspond au sens horaire. La source et le détecteur unidimensionnels sont symbolisés par deux segments perpendiculaires aux directions $\overrightarrow{C_0S}$ et $\overrightarrow{C_0D}$. Le détecteur supporte un axe δ orienté comme indiqué et dont l'origine se situe au point D . L'échelle n'est pas réaliste pour des raisons de clarté de représentation. En réalité, nous avons $r_c, X_c \ll R$, ce qui permet d'approximer certaines expressions.

Le calcul consiste à déterminer le déplacement sur l'axe δ , par rapport à l'origine D , de l'intersection de cet axe avec la droite représentant la direction de diffraction (angle θ par rapport au cristal). Il s'effectue simplement par quelques considérations géométriques et manipulations trigonométriques. Nous obtenons

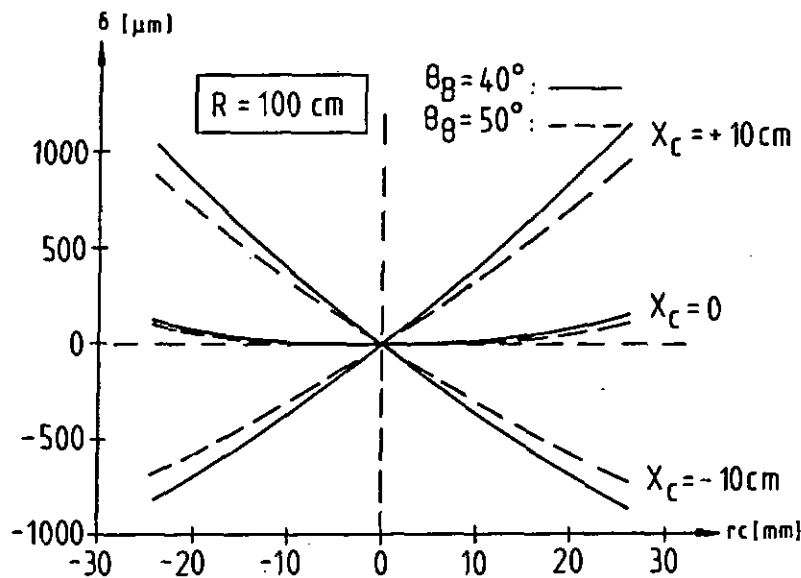
$$\delta(X_c, r_c) = 2R \cos \theta \cdot \left(\frac{1}{\cos \alpha - \sin \alpha \tan \varphi} - 1 \right), \quad (73)$$

où: $\alpha = \frac{r_c}{2R}$ et $\varphi = \frac{X_c}{2R}$.

En utilisant le fait que $\alpha, \varphi \ll 1$, la formule se simplifie en

$$\delta(X_c, r_c) \cong \frac{\cos \theta}{2R} \cdot \left(\frac{r_c^2}{2} + r_c X_c \right) = \frac{\cos \theta}{2R} \cdot \frac{1}{2} [(r_c + X_c)^2 - X_c^2]. \quad (74)$$

Il apparaît que l'aberration présente une dépendance quadratique en fonction de l'éloignement et qu'elle diminue si l'angle θ ou le rayon R augmentent. La représentation graphique de (74) pour différentes valeurs des paramètres R , θ et X_c montre ce comportement.



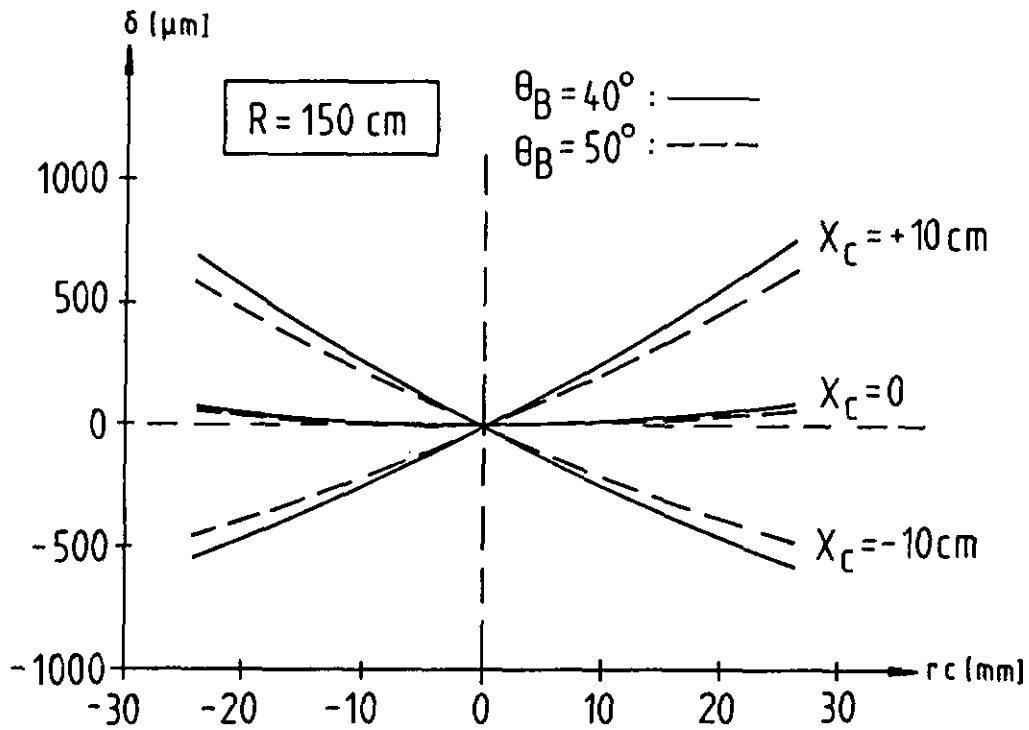


Figure 28: Représentation graphique des aberrations horizontales en fonction de la taille r_c du cristal unidimensionnel.

Cette figure permet d'estimer la taille que devrait avoir les cristaux en fonction de leur éloignement X_c par rapport à C_0 , de telle sorte que l'aberration résultante demeure dans des limites raisonnables. Pour notre spectromètre nous avons choisi des cristaux de 2" (5.08 cm) de diamètre, qui est une dimension standard pour des "wafers" de silicium.

Estimation des aberrations verticales

L'aberration verticale se manifeste aussi par une défocalisation. Pour représenter cet effet nous considérons un cristal unidimensionnel vertical, ainsi qu'une "ligne-source" et une "ligne-détecteur" elles-aussi verticales.

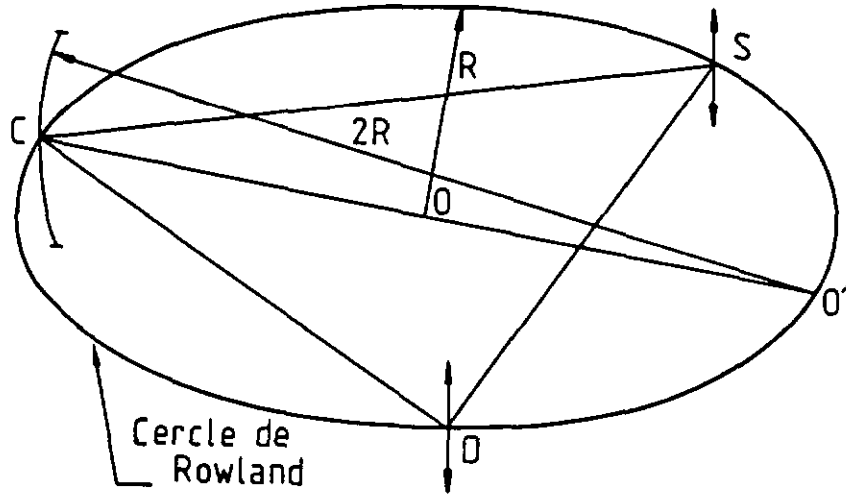


Figure 29: Schéma simplifié pour l'estimation de la défocalisation verticale. C = cristal; S = source X ; D = détecteur; CR = cercle de Rowland.

Le calcul s'effectue par analogie avec l'optique géométrique en considérant le cristal comme un miroir à courbure parabolique. Ceci est justifié par le fait que l'extension du miroir est beaucoup plus petite que son rayon de courbure (40 à 60 fois). Dans ce cas, la formule des lentilles s'applique à notre cristal courbé sphériquement et nous avons:

$$\frac{1}{F} = \frac{1}{A} + \frac{1}{B}.$$

Les quatre cas possibles sont schématisés dans la figure 30 où l'on a représenté en projection latérale le cristal (C) sur le cercle de Rowland (diamètre $2R$). La source et le détecteur, supposés de même extension verticale, se confondent car ils sont disposés symétriquement sur le cercle. Ils sont représentés par le segment $\overline{OO'}$. Le rayon de courbure du cristal vaut $2R$, le point focal se trouve donc à la distance $F = R$. L'image de la source est symbolisée par le segment $\overline{II'}$.

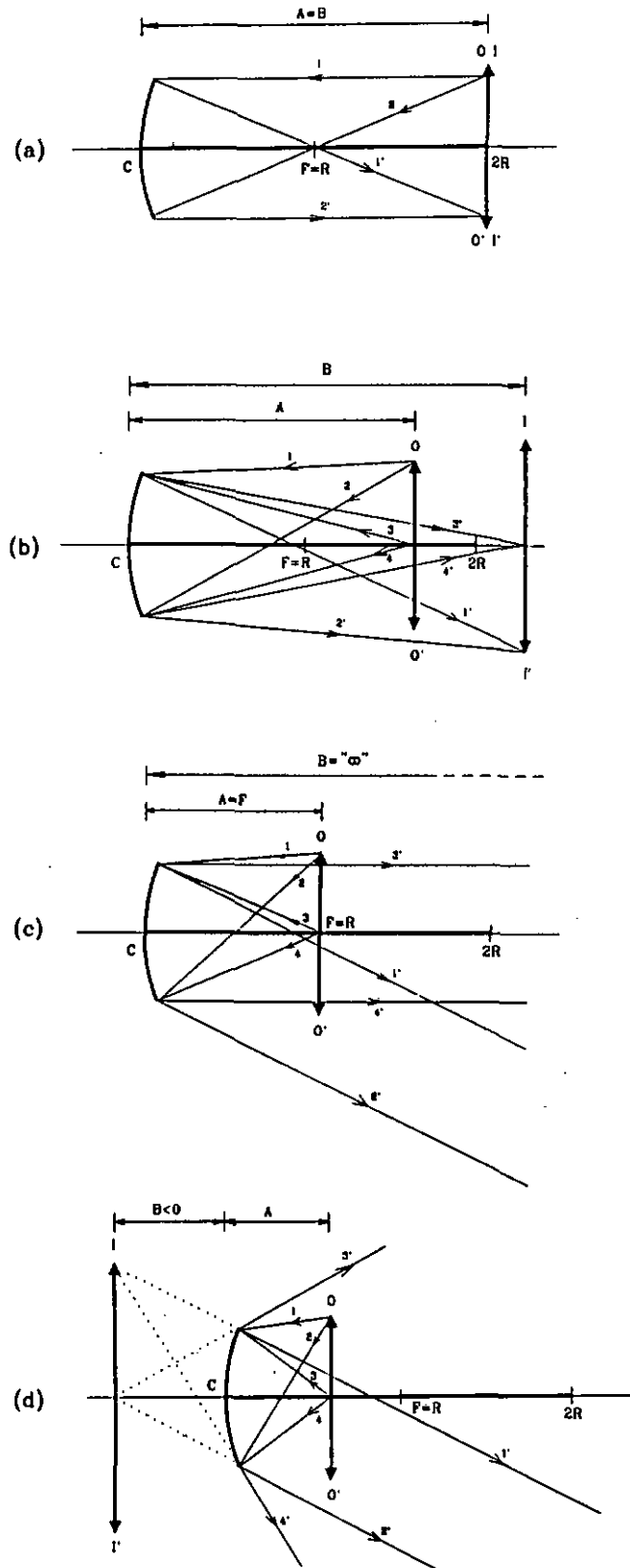


Figure 30: Analogie avec l'optique géométrique: miroir parabolique. Quatre cas possibles, détecteur en: (a) $A=2F$; (b) $F < A < 2F$; (c) $A=F$; (d) $0 < A < F$.

Les notations utilisées pour le calcul sont les suivantes:

A = distance cristal-source (miroir-objet);

B = distance cristal-image (miroir-image);

$F = R$ = distance focale;

H_C = hauteur du cristal;

H_D = hauteur du détecteur (placé à l'endroit de l'objet $\overline{OO'}$).

Le problème consiste à déterminer la proportion des rayons issus de $\overline{OO'}$ qui sont interceptés par le détecteur, après réflexion sur le cristal. A partir de quelques considérations géométriques, on montre [65] que pour un point-source situé à la distance h_0 de l'axe central, tous les rayons émis sont interceptés si la condition suivante est satisfaite:

$$h_0 \leq \frac{1}{2} \left\{ \frac{B}{A} H_D - H_C \left(\frac{B}{A} - \frac{A}{B} \right) \right\} . \quad (75)$$

La distance A peut s'exprimer au moyen de l'angle de Bragg θ_B et du rayon R du cercle de Rowland:

$$A = 2R \cdot \sin^2 \theta_B .$$

La distance focale F valant R , la formule des lentilles permet de calculer la distance B :

$$B = \frac{2R}{1 - \cot^2 \theta_B} .$$

En remplaçant A et B dans (75), nous obtenons

$$h_0 \leq \frac{1}{2 \cos(2\theta_B)} \left\{ \sin^2(2\theta_B) \cdot H_C - H_D \right\} . \quad (76)$$

Cette relation permet de calculer la hauteur maximale sur la source, mesurée à partir du plan du cercle de Rowland, pour laquelle tous les rayons X issus d'un point émetteur sont encore complètement interceptés par le détecteur. Au delà de cette limite, une partie des rayons émis est perdue. Rappelons que les hauteurs de la source et du détecteur sont supposées égales.

A partir de la relation (76) on peut calculer l'efficacité de détection, efficacité que nous noterons n . On considère ici un cristal de même hauteur que la source et le détecteur ($H_C = H_D$). Cette situation correspond assez bien à la nôtre et l'estimation de la défocalisation verticale que l'on obtient est réaliste.

Avec cette simplification, la relation (76) devient:

$$h_0 \leq \frac{1}{2} |\cos(2\theta_B)| \cdot H_D . \quad (77)$$

Considérons maintenant les deux situations extrêmes: la figure 30 montre que la situation la plus favorable correspond au cas (a) et la plus défavorable au cas (c). La situation (a) correspond à l'angle de Bragg $\theta_B = 90^\circ$ et la relation (77) donne alors

$$h_0 \leq \frac{H_D}{2} .$$

Ce résultat indique que pour n'importe quel point d'émission sur la source, tous les rayons seront détectés (voir fig. 31 (a)). En effet, $H_D/2$ correspond à la demi-hauteur de la source. L'efficacité n , donnée par la surface sous la courbe, est alors maximale et nous avons $n = 100\%$.

Dans la situation de la figure 30 (c), l'angle de Bragg vaut $\theta_B = 45^\circ$ et nous obtenons

$$h_0 = 0 .$$

Cela signifie que dès que l'on s'éloigne du centre de la source, une partie des rayons réfléchis n'est plus détectée. Lorsque le point émetteur se situe sur le bord de la source ($h_0 = H_D/2$), la moitié des rayons émis sont perdus. Dans ce cas l'efficacité vaut $n = 75\%$ (voir fig. 31 (b)).

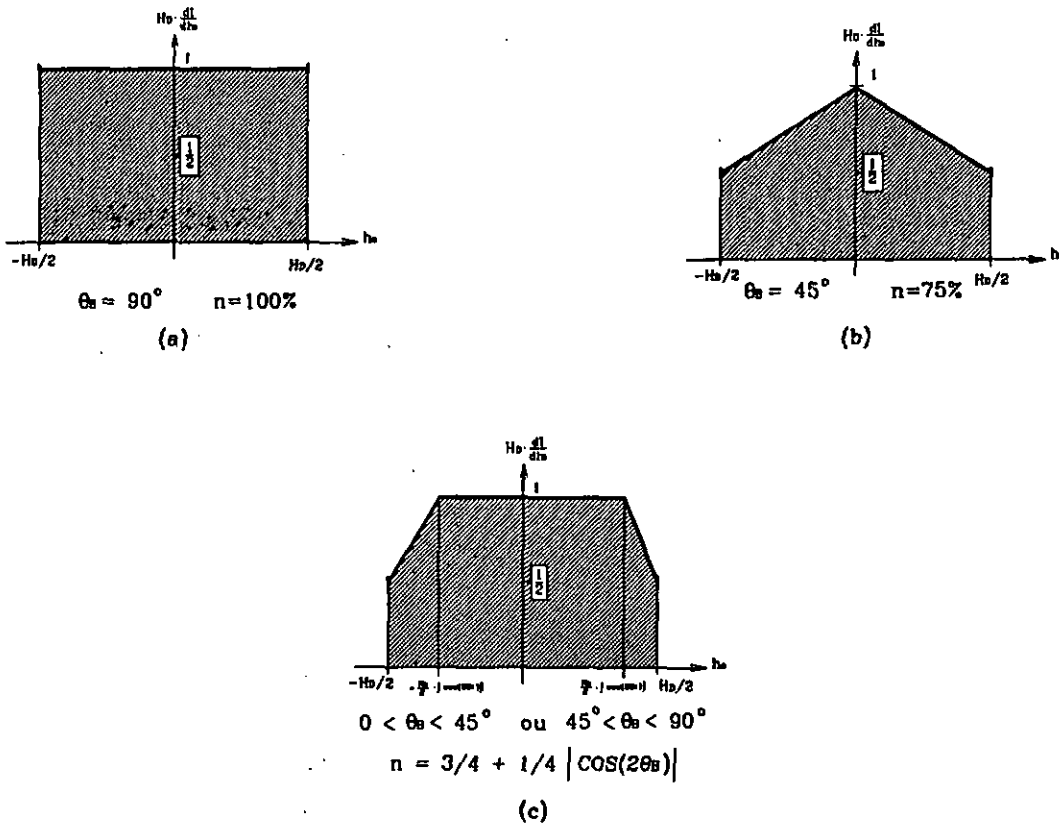


Figure 31: Proportion de rayons X détectés en fonction de la position du point émetteur pour différents angles de Bragg. Efficacité $n \equiv$ surface hachurée.

Dans une situation intermédiaire — ce sont les cas (b) et (d) de la figure 30 — correspondant à $0 < \theta_B < 45^\circ$ ou bien $45^\circ < \theta_B < 90^\circ$, nous obtenons la réponse représentée par la figure 31 (c). Cette situation correspond au cas général et le calcul de l'efficacité donne alors:

$$n = \frac{3}{4} + \frac{1}{4} |\cos(2\theta_B)| . \quad (78)$$

La représentation graphique de n en fonction de θ_B montre que la défocalisation verticale est maximale pour $\theta_B = 45^\circ$, et lorsque la source, le détecteur et le cristal ont la même extension verticale, la perte d'intensité vaut au maximum 25 % .

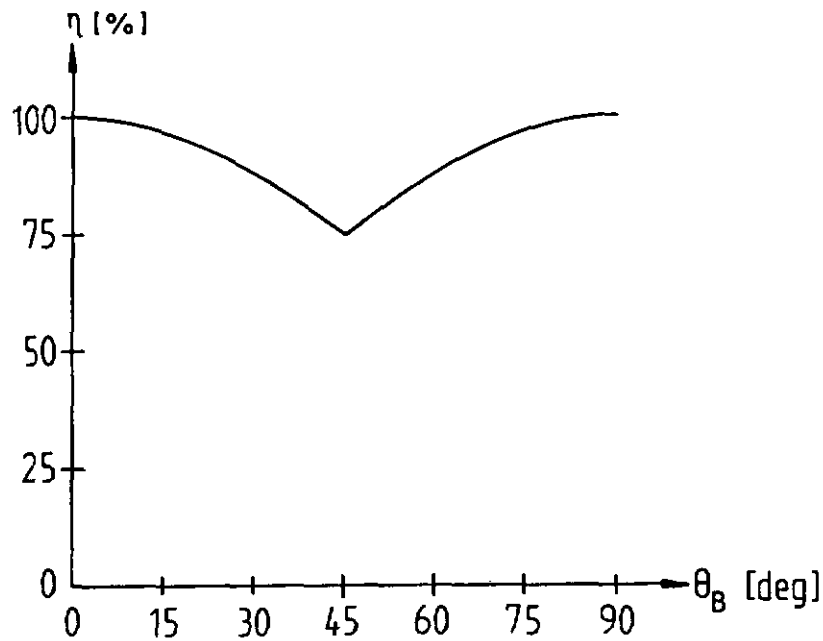


Figure 32: Variation du taux de focalisation n en fonction de l'angle de Bragg θ_B .

Des observations ci-dessus on peut déduire qu'il vaut mieux, pour réduire la défocalisation verticale, mesurer à petit ou à grand angle de Bragg. Mais nous avons vu qu'aux petits angles ce sont les aberrations horizontales qui augmentent.

Remarquons que ces résultats ne sont valables que dans le cas d'un rayon de courbure sphérique valant $2R$. Dans l'hypothèse qu'il soit possible d'appliquer deux rayons de courbure différents au cristal (courbure toroïdale), et que le rayon de courbure verticale soit donné par $\rho = 2R \sin^2 \theta_B$, nous n'aurions alors aucune défocalisation verticale.

Calculs pour un cristal étendu

Nous pouvons maintenant aborder le cas d'un cristal circulaire mince, d'un rayon de 2.5 cm . On le suppose courbé sphériquement selon le rayon $\rho = 2R$. La source et le détecteur sont considérés comme deux plans verticaux, placés perpendiculairement aux directions $\overline{CS}$ et $\overline{CD}$.

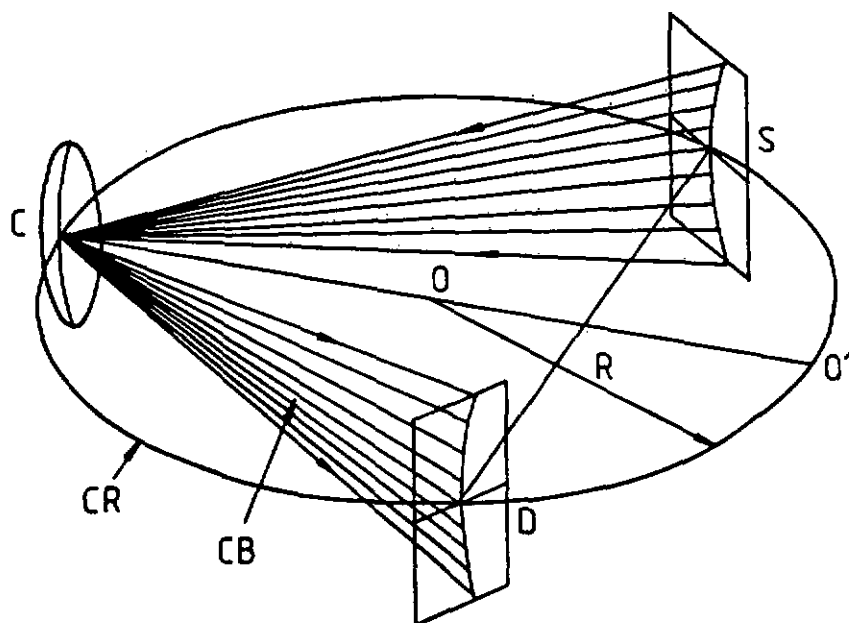


Figure 33: Représentation géométrique plus réaliste pour un cristal unique (échelle non respectée). C, S, D, CR comme avant; CB = cône de Bragg.

La méthode de calcul est la suivante: chaque point du cristal diffracte sous l'angle θ_B des rayons X incidents d'énergie correspondante. L'ensemble des directions d'incidence et de diffraction satisfaisant la loi de Bragg pour le point considéré forme les génératrices d'un cône que nous appellerons *cône de Bragg*.

L'image obtenue sur le détecteur est constituée par la superposition des intersections des cônes de Bragg issus de chaque point du cristal avec le plan de détection. Pour le calcul effectif on suppose que la surface cristalline diffracte avec une intensité uniforme; les points formant le sommet des cônes de Bragg représentent chacun un élément de cette surface. Les points sont choisis de façon à couvrir la surface de manière uniforme.

Le problème étant de nature purement géométrique, nous avons développé une formule analytique permettant de calculer l'intersection de chaque cône de Bragg avec le plan-détecteur. Nous ne reproduisons pas ici le long et fastidieux développement aboutissant à cette formule, suffisamment complexe pour que l'emploi d'un ordi-

nateur s'avère nécessaire. Les figures ci-dessous résument clairement les résultats obtenus.

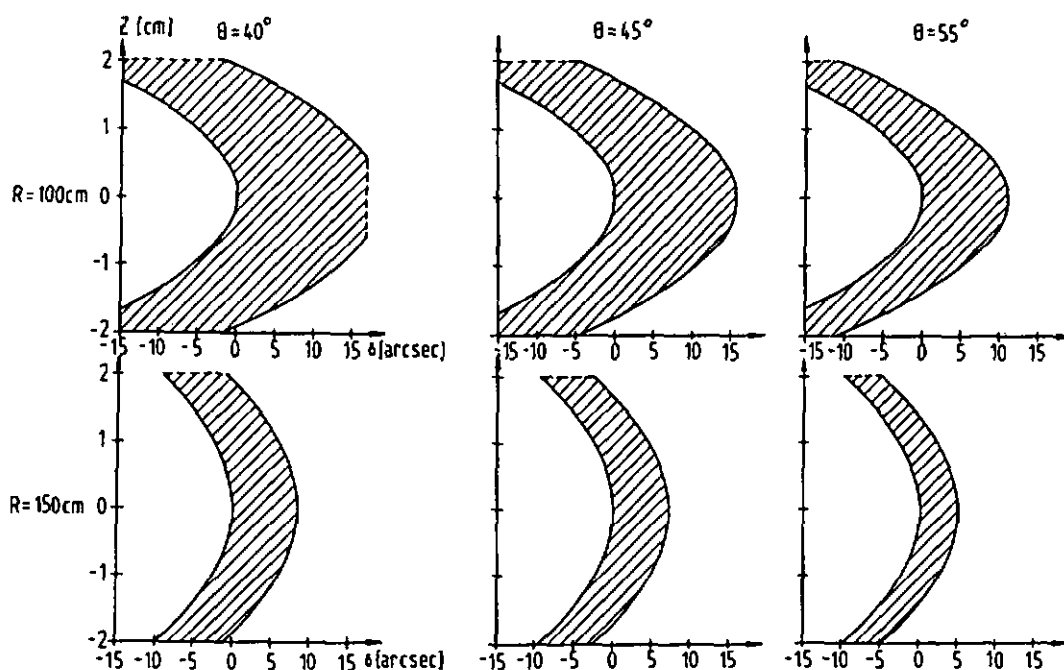


Figure 34: *Aberrations géométriques pour un cristal unique pour différents angles de Bragg (40° à 55°) et deux rayons du cercle de Rowland (100 cm et 150 cm).*

Ces graphiques représentent "l'enveloppe" des intersections avec tous les cônes de Bragg. Le plan de détection est vu depuis le cristal.

Nous constatons qu'il vaut mieux mesurer à grand angle de Bragg et sur un cercle de Rowland de grand rayon — rayon de courbure en proportion — pour un cristal de taille fixée (5 cm ici). Toutefois, si l'énergie à mesurer est fixée et le cristal déjà choisi, il n'est plus possible de choisir l'angle de Bragg. D'autre part, l'augmentation du rayon de cercle de Rowland se fait au grand détriment de l'angle solide convert par le cristal, interdisant cette procédure lors de mesures à faible intensité.

Dans le cas où le choix de la raie mesurée est possible, il convient d'utiliser celle qui présente la plus faible énergie — angle de Bragg le plus grand — même si cela augmente légèrement la distance cristal-détecteur et diminue un peu l'angle solide.

Les graphiques de la figure précédente ne rendent pas compte de la distribution d'intensité sur le détecteur qui n'est pas uniforme. On le voit sur la figure ci-dessous, où l'on a représenté la répartition d'intensité sur le plan de détection (vue 3D), puis selon une coupe centrale et enfin selon la projection suivant l'axe vertical du détecteur.

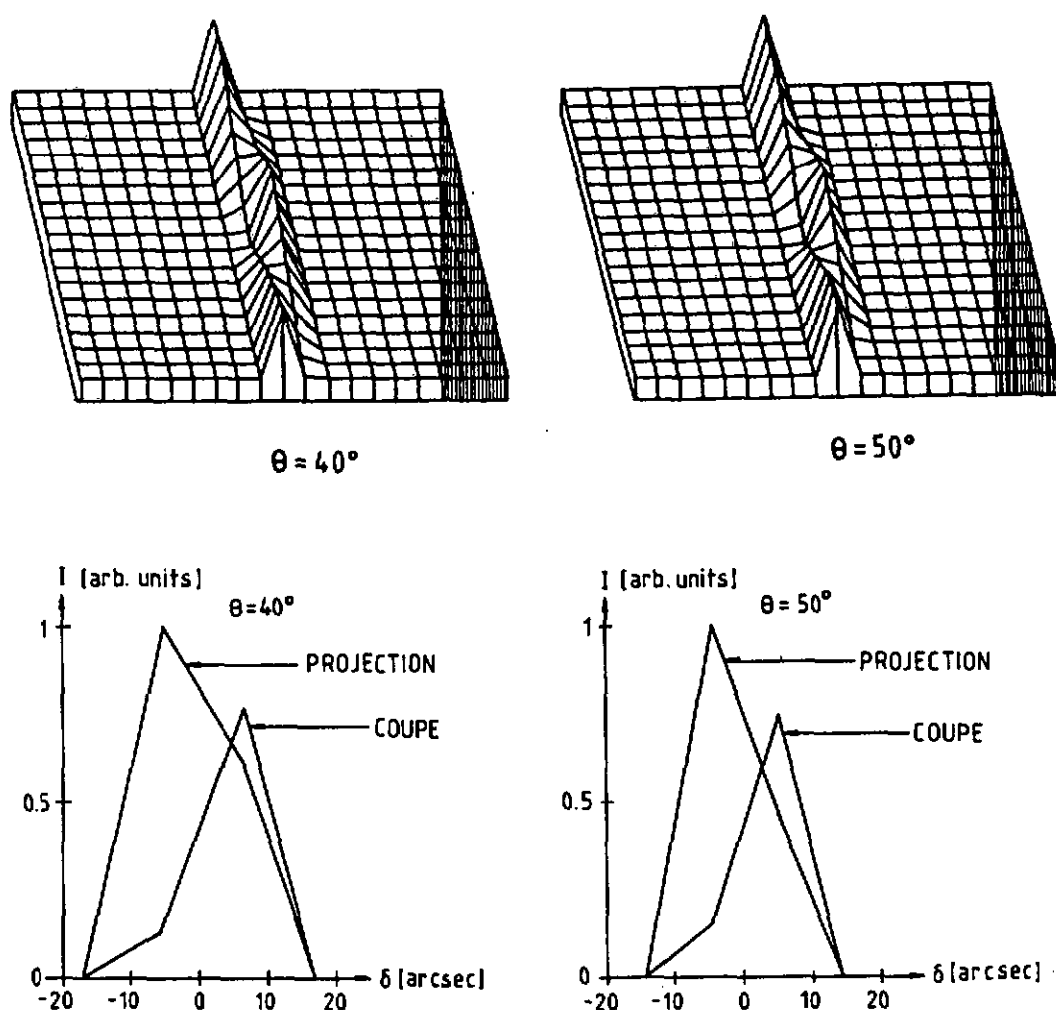


Figure 35: Distributions d'intensité correspondant aux graphiques de la figure précédente. $R = 150 \text{ cm}$, $\theta_B = 40^\circ$ et 50° .

La non-uniformité de la distribution d'intensité provient uniquement, dans la situation exposée ici, de la géométrie du problème.

Cas général

Nous avons maintenant une première idée de l'importance et de la forme des aberrations géométriques produites par un cristal unique placé selon la figure 33. Dans un souci de plus grande généralité, nous avons également étudié le cas où le cristal précédent — que nous appellerons *central* — serait entouré par des cristaux de même taille, orientés de telle sorte que les axes issus de leur centre passent par la ligne $\overline{SD}$ joignant la source et du détecteur. Nous nous limitons ici au cas du rayon $R = 150\text{ cm}$ pour le cercle de Rowland et un angle de Bragg $\theta = 50^\circ$, les cristaux possèdent toujours le même diamètre de 5 cm . Cette limitation volontaire n'enlève rien à la généralité des conclusions qui suivront.

La figure suivante schématise le traitement pour trois cristaux jouxtant le cristal central:

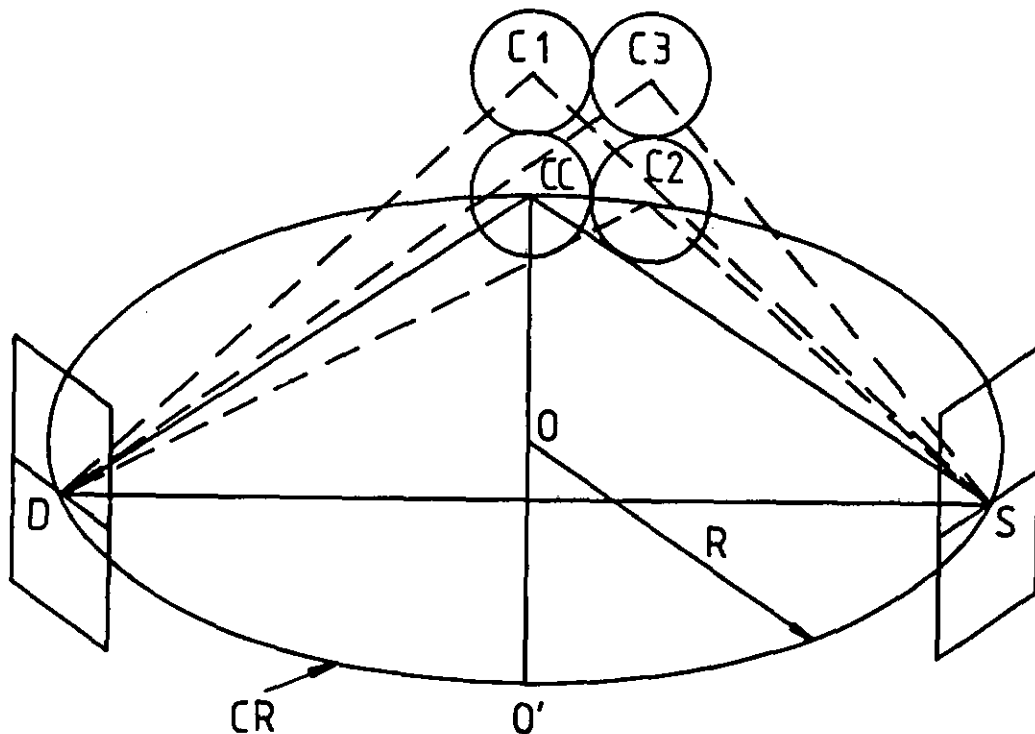


Figure 36: Disposition des cristaux pour le calcul des aberrations dans le cas général. S, D, CR comme avant; CC = cristal central; $C_{1,2,3}$ = cristal 1, 2 et 3.

Les résultats obtenus pour chacun des trois cristaux sont donnés sous forme graphique ci-dessous:

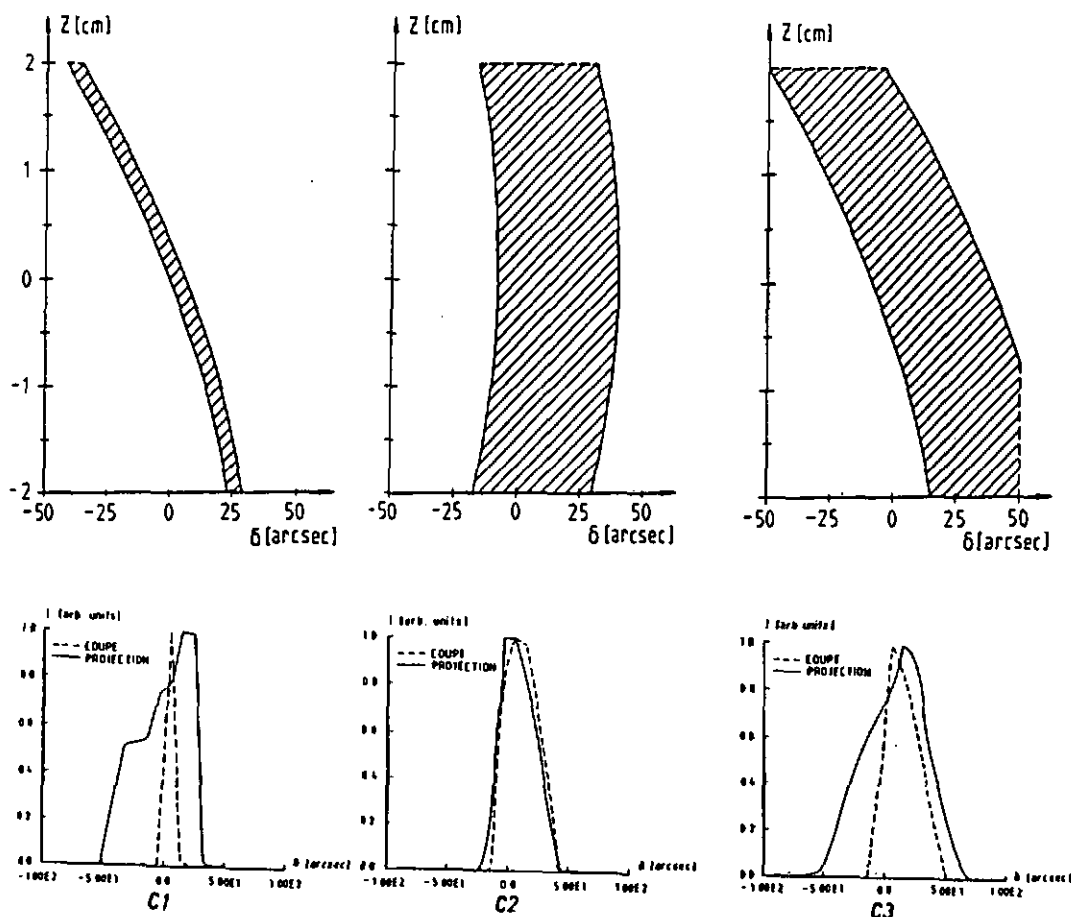


Figure 37: Aberrations géométriques pour des cristaux "décentrés".

Les trois remarques qui suivent résument les résultats obtenus.

- Un déplacement vertical (cristal C_1) provoque une "rotation" de la trace des intersections sur le plan-détecteur, mais la largeur de cette trace n'a pratiquement pas augmenté (comparer avec la figure 34). L'angle de rotation est proportionnel à l'amplitude du déplacement et le sens de rotation dépend du sens du déplacement.
- A l'inverse, un déplacement latéral (cristal C_2) ne produit pas de rotation, mais un fort élargissement de la trace; cet élargissement est le même quel que soit le sens du déplacement et il augmente si on s'éloigne davantage du cristal central. Ceci s'explique par le fait que seule la partie centrale du cristal satisfait alors la condition de focalisation et dès qu'on s'éloigne du centre, le déplacement de la trace augmente avec le carré de l'éloignement.

- Le déplacement du cristal C_3 peut être considéré comme la superposition des deux déplacements précédents, ce n'est donc pas une surprise de constater une rotation *et* un élargissement de la trace. De la même manière, un déplacement quelconque peut se réduire à la superposition d'un déplacement vertical et d'un déplacement horizontal. N'apportant rien de plus à la compréhension, ces déplacements quelconques ont été omis volontairement: les résultats sont tout-à-fait symétriques.

Les profils d'intensité correspondant à chacun des cas complètent cette analyse.

Une dernière remarque avant d'aborder la configuration finale retenue, remarque résultant d'une constatation faite lors d'essais de différentes configurations. Pour un cristal déplacé verticalement, il est aussi possible de l'orienter de telle sorte que l'axe issu de son centre passe par le point O' (voir fig. 36) plutôt que par la ligne $\overline{SD}$. Il en résulte alors une curieuse propriété: la trace de détection ne subit plus de rotation; elle est d'une certaine manière "redressée" et se confond alors avec celle obtenue avec un cristal non déplacé. Bien entendu, cet effet ne s'obtient pas sans une perte en contrepartie. Ici, elle se cache sous la forme d'une défocalisation verticale supplémentaire, peu souhaitable dans notre cas. Mais si les effets d'aberration sont prépondérants dans la contribution aux incertitudes de mesure, il peut s'avérer utile de se souvenir de cette curieuse propriété.

II.4.3 Conception finale du spectromètre

La synthèse des résultats précédents nous permet de formuler quelques "règles" simples dans le but de limiter raisonnablement l'effet de défocalisation dû aux aberrations géométriques.

- 1°. Le diamètre des cristaux et le rayon du cercle de Rowland — définissant le rayon de courbure — seront choisis pour obtenir un compromis entre une bonne efficacité de détection (grand angle solide) et une défocalisation horizontale aussi faible que possible.
- 2°. Si le type d'expérience envisagée permet de choisir la raie X mesurée, on préférera celle de plus faible énergie (angle de Bragg le plus grand). Ceci permet de diminuer la défocalisation horizontale (et aussi la défocalisation verticale si $\theta_B > 45^\circ$).
- 3°. Si une courbure toroïdale des cristaux n'est pas envisageable, on évitera, dans la mesure du possible, de mesurer au voisinage de $\theta_B = 45^\circ$, où la défocalisation verticale est maximale (voir fig. 32).
- 4°. Si le spectromètre se compose de plusieurs cristaux juxtaposés, il faut veiller à ne pas trop s'étendre, ni horizontalement (augmentation de la largeur de la trace-image), ni verticalement (rotation de la trace-image), comme le montre la figure 37. Il est aussi possible de limiter ces effets en réduisant la taille des cristaux adjacents.

Dans la conception de notre spectromètre, la solution retenue se base sur la constatation suivante: disposant d'une source de rayons X *étendue*, une acceptation angulaire importante au niveau de la source est admissible si son extension est suffisante. Nous avons donc opté pour une configuration avec plusieurs cristaux juxtaposés. Mais, et c'est ici que réside l'originalité de notre instrument, *le rayon de courbure est différent pour chaque cristal*. Ce rayon de courbure est déterminé par la distance cristal-détecteur, fixée à priori par la position du cristal. Tout se passe comme si chaque cristal possédait *son propre cercle de Rowland*, adapté à sa position particulière. Cette description est illustrée par la figure suivante, où l'on prêterait attention au fait que l'extension de la source doit couvrir l'acceptation angulaire de tous les cristaux simultanément.

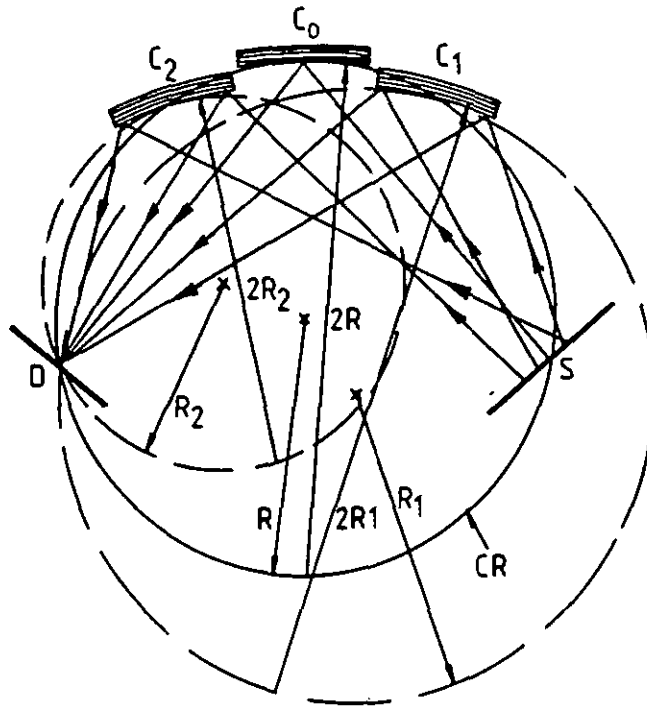


Figure 38: *Illustration du principe de la conception finale du spectromètre (échelle non respectée). S,D comme avant; CR= cercle de Rowland "principal"; $C_{0,1,2}$ = cristaux.*

Ainsi avons-nous imaginé un assemblage de 13 cristaux identiques de 2" de diamètre. Le rayon de courbure de chacun a été calculé dans l'hypothèse de la mesure de la transition $2P-1S$ de π^-H à 2434.5 eV. L'angle de Bragg pour le silicium orienté (111) vaut $\theta_B = 54.3^\circ$. Le rayon du cercle de Rowland principal a été fixé à $R \approx 150$ cm.

Vu de face, cet ensemble de cristaux se présente sous la forme suivante:

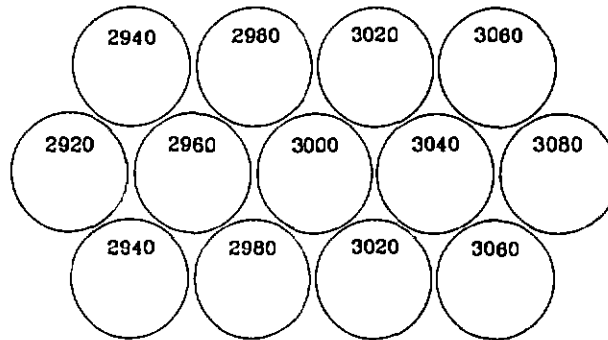


Figure 39: *Partie diffractante du spectromètre: 13 cristaux de même taille, mais de rayons de courbure différents (donnés en mm dans les cercles).*

Ces cristaux sont orientés de telle sorte que l'axe passant par leur centre intercepte la ligne source-détecteur. Les aberrations géométriques résultantes ont été calculées de la même manière que précédemment. Nous donnons les résultats sous forme graphique pour l'ensemble des 13 cristaux en admettant un détecteur de 6 cm de hauteur.

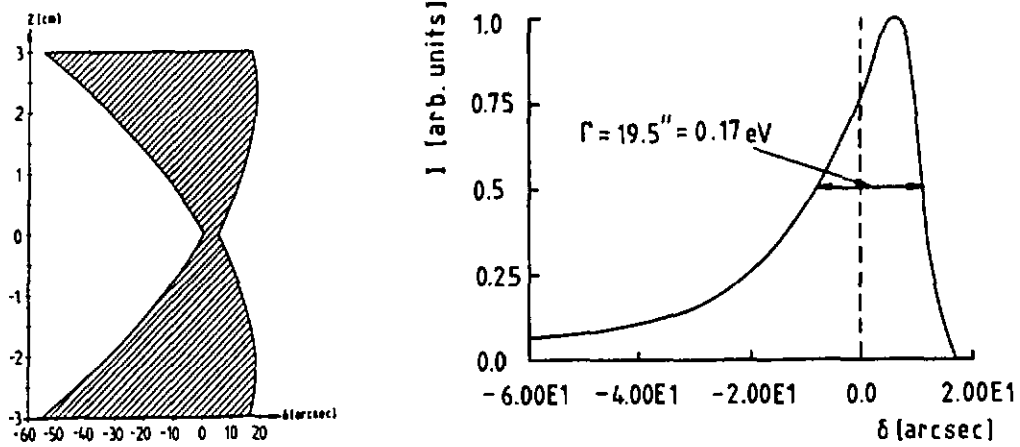


Figure 40: Aberrations géométriques et distribution d'intensité pour l'ensemble des 13 cristaux de la figure précédente.

Le graphique de gauche montre la trace-image sur le détecteur et la courbe de droite représente la distribution d'intensité en projection selon l'axe vertical du détecteur. Dans le but de quantifier l'effet de défocalisation dû aux aberrations géométriques, nous pouvons utiliser le graphique de droite en estimant la largeur à mi-hauteur (FWHM). Dans notre situation, nous pouvons estimer cette largeur à environ 19.5'', correspondant à 0.17 eV à 2.5 keV et à 0.32 eV à 3 keV.

Nous avons estimé l'acceptance horizontale sur la source à environ 2 mm. Une source ayant cette extension suffit donc à couvrir l'ouverture angulaire de l'ensemble des cristaux.

En conclusion de ce paragraphe, nous pouvons prévoir que la disposition des cristaux telle que nous venons de la décrire, avec des rayons de courbure adaptés à chaque position, ne dégrade pas significativement la résolution de notre spectromètre en comparaison d'un spectromètre idéal (résolution infinie) utilisé dans nos conditions expérimentales. En effet, la largeur de raie attendue est de 0.6 à 0.8 eV, bien supérieure à l'élargissement dû aux aberrations géométriques. Le seul inconvénient de cette géométrie est la perte d'intensité ($\sim 25\%$) par défocalisation verticale au voisinage de $\theta_B = 45^\circ$. Une courbure toroïdale plutôt que sphérique pourrait pallier cette perte.

II.5 Technique de courbage des cristaux

Parmi toutes les méthodes de courbage de cristaux — voir par exemple [60], [63] et [64] — nous avons choisi celle qui à notre avis permettait d'assurer précisément les rayons de courbure désirés. En effet, la précision requise pour notre instrument est de l'ordre de 2 à 3‰ pour des courbures de $1/2$ ou $1/3 \text{ m}^{-1}$, très difficile à obtenir en courbant directement les cristaux par des moyens mécaniques.

II.5.1 Méthode générale

Nous avons opté pour une solution faisant appel à un support externe ayant la courbure adéquate, sur lequel vient collé — éventuellement soudé — le cristal de silicium de faible épaisseur. Ce support, en l'occurrence un miroir de verre plan-concave à courbure sphérique, est fabriqué couramment avec une bonne précision dans l'industrie optique. Notre fournisseur [66] nous a pourvu de plusieurs de ces supports de 10 mm d'épaisseur et 52 mm de diamètre, avec les rayons de courbure désirés.

Nous avons contrôlé la précision de cette courbure au moyen de la méthode dite "de Foucault". Celle-ci consiste à placer un point-source lumineux à une distance du miroir égale au rayon de courbure prévu et, avec un couteau placé symétriquement à la même distance, on intercepte l'image lors de son observation. Le schéma ci-dessous facilite la description de cette technique.

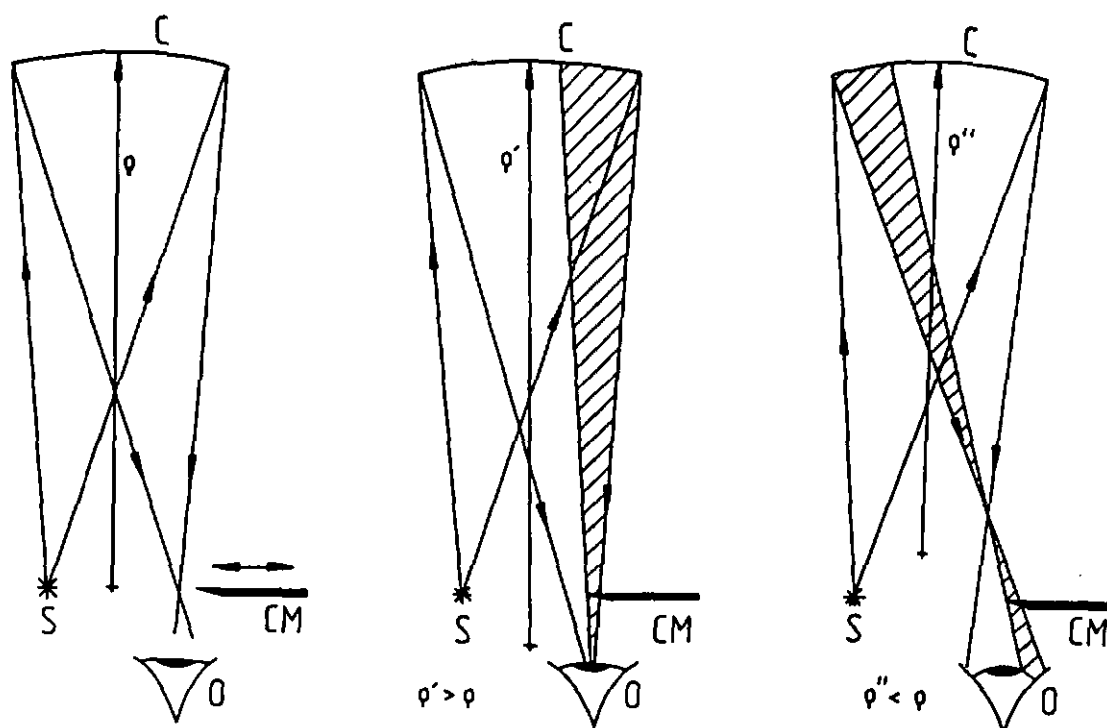


Figure 41: Mesure du rayon de courbure par la méthode de Foucault. C= cristal; S= source lumineuse ponctuelle; CM= couteau mobile; O= observateur.

A l'observation, le miroir sphérique apparaît complètement éclairé. Si le rayon de courbure correspond à celui attendu, la source et le couteau étant placés à une distance du miroir égale à ce rayon, alors on observe une extinction uniforme du miroir lorsque le couteau intercepte le point image. Si le rayon de courbure est incorrect, le miroir s'éteint par la droite ou par la gauche selon que ce rayon est trop grand ou trop petit.

Par approximations successives, on détermine le rayon de courbure réel du miroir observé. La précision de cette méthode est très grande, de l'ordre de 1‰, comparable à la méthode des anneaux de Newton. En plus de l'information quantitative, la méthode de Foucault fournit encore une information qualitative en mettant en évidence les petites irrégularités de courbure qui apparaissent éclairées de manière non uniforme et s'obscurcissent à des instants différents.

Nous avons pu ainsi constater que la réalisation de courbures de $1/2$ à $1/3 \text{ m}^{-1}$ avec d'aussi faibles tolérances que 2‰ à 3‰ était difficile, même pour des professionnels de l'optique. Nos mesures ont montré que la précision était de l'ordre de 1% et que la régularité de la surface, bien que suffisante, n'atteignait pas la qualité escomptée. On peut donc s'attendre à un effet de défocalisation supplémentaire provenant des irrégularités de la courbure qui aura pour effet de dégrader la résolution.

Disposant des supports en verre, il s'agissait ensuite de trouver un fournisseur de cristaux de silicium et une méthode de collage pour les fixer sur leur support. Divers essais avec des cristaux provenant de différents fabricants ont été effectués. Nous avons finalement pu nous assurer la collaboration du Dr A. Huizing des laboratoires Philips [67]. Celui-ci nous a fourni 13 excellents "wafers" de silicium monocristallin présentant les caractéristiques suivantes:

- diamètre: 2";
- épaisseur: $110 \mu\text{m}$;
- parallélisme des faces: $\pm 3 \mu\text{m}$;
- orientation: [111];
- déviation de l'orientation des plans cristallins (111) par rapport à la surface: $\pm 72''$ d'arc;
- polissage: traitement mécano-chimique des surfaces;
- rugosité: $0.01 \mu\text{m rms}$.

Deux méthodes de collage ont été essayées successivement en vue d'obtenir la courbure désirée des cristaux.

II.5.2 Soudage anodique (Anodic Bonding)

Cette technique originale (cf. réfs [68] et [69]) permet de souder des métaux et des semi-conducteurs sur du verre sans apport de matière liante. Elle consiste à chauffer l'assemblage verre-silicium entre $300^{\circ}C$ et $400^{\circ}C$ et à appliquer ensuite une forte tension positive (500 à 1000 Volts) sur le silicium. Des liaisons à l'interface verre-silicium se créent alors de façon irréversible: la soudure subsiste après refroidissement et coupure de la tension.

Bien que d'apparence simple et élégante, le soudage anodique présente plusieurs inconvénients. En premier lieu le choix du verre. Il faut que son coefficient de dilatation thermique soit aussi proche que possible de celui du silicium sans quoi, lors du refroidissement, le verre se fracture sous l'effet des énormes contraintes auxquelles il est soumis. Dans ce but, le verre Pyrex (Corning N° 7740) semble bien convenir. D'autre part, il est nécessaire que les surfaces en contact soient d'une très grande propreté afin d'assurer l'homogénéité de la soudure en évitant que des poussières s'intercalent entre les deux matériaux. Finalement, nous avons constaté que la haute température à laquelle le verre est soumis le rendait plus fluide, et que les forces électrostatiques très importantes qui se développent à l'interface sont suffisantes pour déformer par fluage la surface du verre et altérer sa courbure. C'est à notre avis l'inconvénient majeur. Ajoutons à cela l'irréversibilité de la méthode: en cas de "raté", le support en verre et le cristal de silicium sont irrémédiablement perdus. Nous avons donc abandonné ce procédé au profit d'une procédure de collage plus délicate, mais donnant de meilleurs résultats.

II.5.3 Collage sous vide

Cette seconde méthode nous a été suggérée par le professeur Y. Baer [70] qui l'a utilisée avec succès dans la construction d'un spectromètre à cristal de quartz. Le mode opératoire est le suivant: après un nettoyage sérieux des surfaces à coller (cycle de bains à ultrasons avec successivement acétone - méthanol - eau déionisée), les surfaces sont séchées à l'air comprimé. On les enduit ensuite d'une très faible quantité de graisse silicone (graisse optique) que l'on répartit uniformément sur toute la surface du support en verre ainsi que sur le "wafer" de silicium. De part la très faible épaisseur du cristal, sa manipulation à mains nues est très délicate: étant rigide, la moindre contrainte le brise. C'est pourquoi nous avons utilisé un support en teflon de même diamètre que le cristal et une série de petits trous pratiqués à travers ce support permettaient de maintenir en place le cristal par aspiration.

L'excès de graisse est ensuite progressivement éliminé à l'aide de papier optique jusqu'à ce qu'il n'en subsiste pratiquement plus trace à l'oeil nu. Il n'en reste alors qu'une "monocouche". Les pièces ainsi préparées doivent encore être débarrassées des inévitables poussières qui s'y seront déposées.

Pour cette délicate et fastidieuse opération, il convient de travailler dans une salle "propre" et sous une hotte aspirante. L'utilisation d'un pinceau souple antistatique s'est révélée indispensable. Celui que nous avons utilisé était muni d'une source radioactive ionisante de faible activité. La ionisation produit un champ électrostatique qui empêche la redéposition de la poussière dans une large mesure. Avec un peu de patience il est possible d'éliminer pratiquement toutes les poussières d'une taille supérieure au demi-micron.

Les deux surfaces sont maintenant prêtes pour le collage proprement dit. On les met en contact et on place l'ensemble sous vide. Lorsque le vide est suffisant — vide préliminaire d'environ 10^{-3} *torrs* — on applique une pression de 3 à 5 *bars* uniformément sur le cristal à travers une membrane élastique, comme le suggère le dessin suivant:

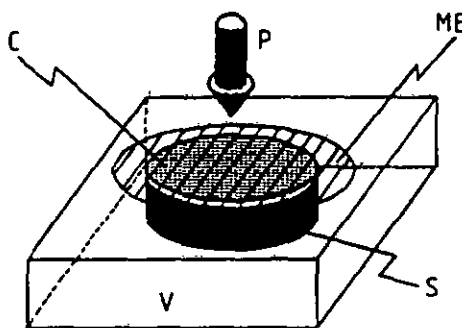


Figure 42: *Principe de la méthode de collage des cristaux sur leur support en verre.*
C= cristal; S= support; ME= membrane élastique; P= pression; V= enceinte sous vide.

La pression sur la membrane et le vide de la chambre contenant le cristal et son support sont maintenus pendant 2 à 3 heures. Finalement, lorsque les conditions normales de pression sont rétablies, la graisse présente à l'interface verre-silicium fait office de joint d'étanchéité, empêchant l'air de pénétrer entre les 2 surfaces. La pression atmosphérique maintient le cristal plaqué contre son support.

Cette méthode semble suffisamment fiable, car 20 mois plus tard les cristaux demeurent toujours collés! Elle présente en plus deux avantages importants. La transparence du support permet un contrôle aisé de la qualité du collage, la moindre poussière manifestant sa présence par des franges d'interférence. Le nombre de ces franges donne un ordre de grandeur de la taille de la poussière qui les provoque. Le second avantage se situe dans la réversibilité de la méthode. En effet, un bain d'acétone dans une cuve à ultrasons vient à bout d'un collage insatisfaisant en moins d'une heure: cristal et support se séparent progressivement sans dommage. Il nous est arrivé de répéter jusqu'à 4 fois un collage avec le même cristal et le même support! L'économie de matériel est donc importante.

Les cristaux ainsi assemblés ont été utilisés dans une atmosphère d'hélium sans aucun problème. On pourrait toutefois prévoir quelques difficultés lors d'une utilisation sous vide, le cristal n'étant plus maintenu par la pression externe.

Nous pensons que cette méthode est sans autre applicable à des courbures autres que sphériques. Il suffirait de réaliser les supports adaptés à ces courbures spécifiques.

II.6 Tests à 5.9 keV et 2.6 keV

Les cristaux courbés selon la méthode décrite ci-dessus ont été testés à l'aide d'un appareillage simplifié. Nous disposons de 2 sources de rayons X: la première était une source Fe^{55} produisant la raie $Mn(K_\alpha)$ à 5895 eV, et la seconde un simple morceau de PVC produisant par fluorescence la raie $Cl(K_\alpha)$ à 2621 eV. Les angles de Bragg correspondant sont $\theta_B = 19.6^\circ$ pour $Mn(K_\alpha)$ et $\theta_B = 48.9^\circ$ pour $Cl(K_\alpha)$ dans le cas de $Si(111)$.

Le dispositif utilisé pour la mesure de $Mn(K_\alpha)$ est schématisé dans la figure suivante:

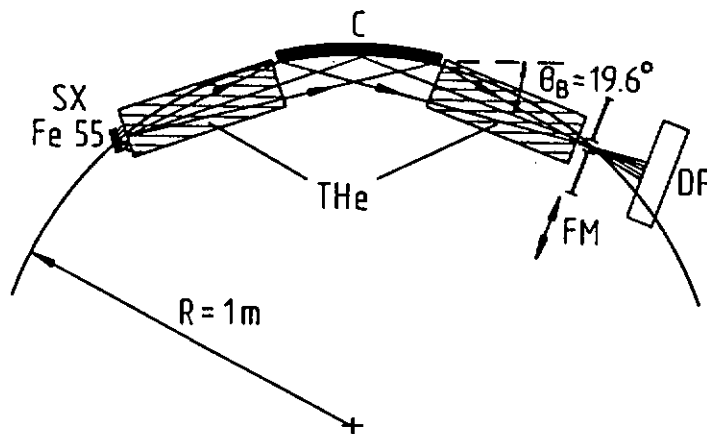


Figure 43: Dispositif de mesure simplifié pour le test des cristaux à 5.9 keV. C= cristal; SX= source X (Fe^{55}); DP= détecteur proportionnel; FM= fente mobile; THE= tunnels à hélium.

Il est constitué des éléments suivants: la source étendue Fe^{55} est placée sous l'angle correspondant à 5.9 keV et irradie le cristal. Symétriquement, un détecteur proportionnel au xénon est placé derrière une fente de largeur ajustable. La mesure consiste à relever l'intensité des rayons X détectés en fonction de la position de la fente, reconstruisant ainsi le réflexe diffracté par le cristal. Pour améliorer le taux de comptage, nous avons diminué l'absorption dans l'air en plaçant des "tunnels à hélium" sur le trajet des rayons X.

Dans le cas de la mesure à 2.6 keV, les pertes d'intensité dues à la fluorescence étaient telles, qu'une absorption supplémentaire des rayons X dans l'air — très importante à cette faible énergie — rendait la mesure impossible. Nous avons donc réalisé ce

test entièrement dans l'hélium. Nous disposons pour ce faire de l'infrastructure d'un spectromètre à cristal de graphite [71] utilisé dans une précédente expérience [72], muni d'un détecteur sensible à la position [73]. Quelques modifications mineures nous ont permis d'adapter cet instrument à la mesure de $Cl(K_\alpha)$. Le principe de la mesure est identique à celui représenté dans la figure 43. Les graphiques de la figure suivante montrent les résultats de ces deux mesures.

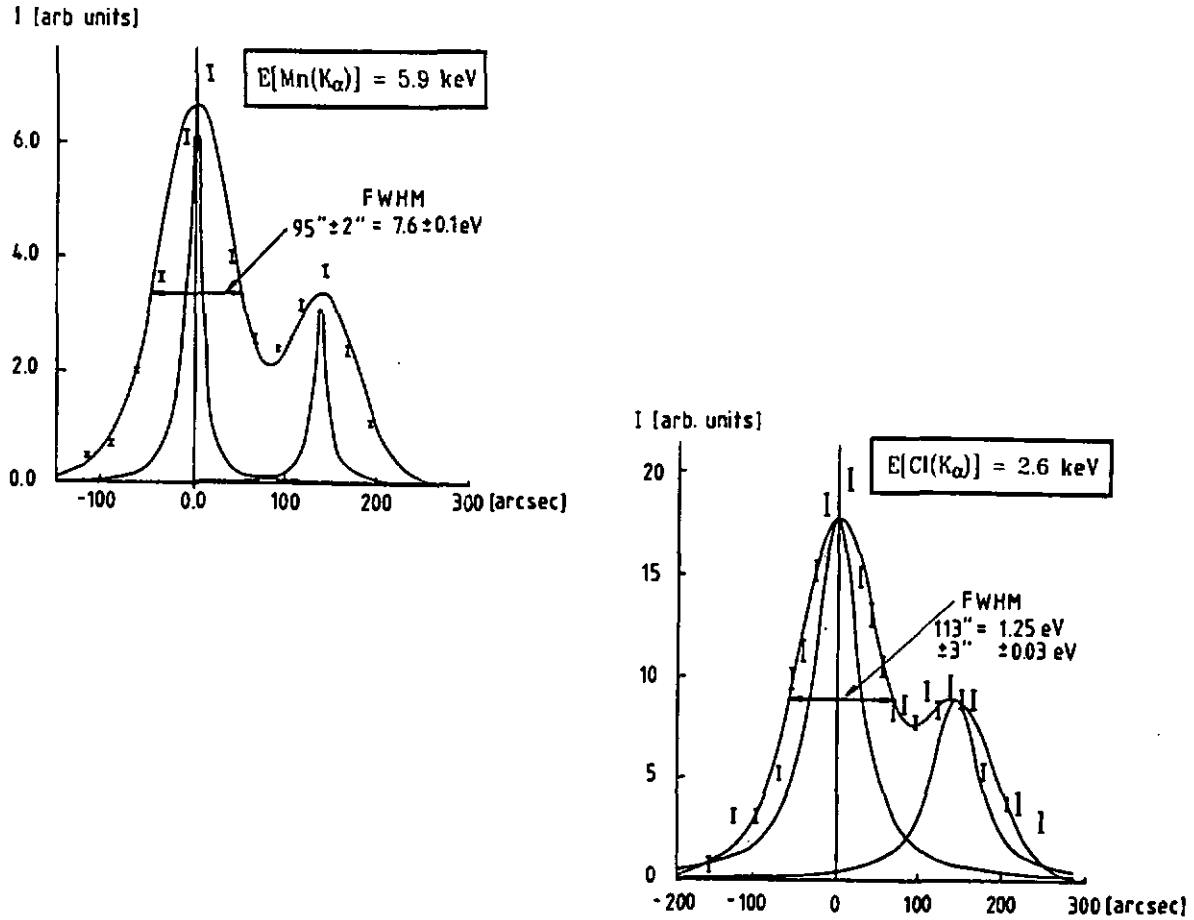


Figure 44: Résultats des tests de cristaux de $Si(111)$ à 5.9 keV et 2.6 keV.

Nous voyons apparaître les deux composantes $K_{\alpha 1}$ et $K_{\alpha 2}$ séparée par 11.1 eV pour $Mn(K_\alpha)$ et par 1.61 eV pour $Cl(K_\alpha)$. Les paramètres de la courbe ajustée sur les points de mesure sont déterminés à l'aide du programme de minimalisation de fonction MINUIT du CERN [74]. La fonction ajustée est une somme de deux gaussiennes avec des "queues" exponentielles. La position et l'intensité relatives sont fixées à priori à partir des valeurs tabulées [75]. Nous avons aussi représenté la contribution "naturelle" par des lorentziennes dont la largeur à mi-hauteur est donnée dans la réf. [76].

La résolution instrumentale proprement dite, c'est-à-dire la contribution provenant du cristal uniquement, s'obtient en soustrayant quadratiquement à la largeur totale mesurée (Γ_{mes}) les diverses contributions qui sont: la largeur naturelle (Γ_{nat}), la largeur due aux aberrations géométriques (Γ_{geom}) et la largeur de la fente devant le détecteur (Γ_{fente}). Les valeurs de ces largeurs, ainsi que la résolution instrumentale résultante (Γ_{instr}) sont regroupées dans le tableau suivant.

<i>Energie</i>	Γ_{mes}	Γ_{nat}	Γ_{geom}	Γ_{fente}	$\Gamma_{instr} = \sqrt{\Gamma_{mes}^2 - \Gamma_n^2 - \Gamma_g^2 - \Gamma_s^2}$
5.9 keV	95'' $\pm$ 2''	18.4''	$\sim$ 82''	20.9''	39'' $\pm$ 4''
	7.6 $\pm$ 0.1 eV	1.48 eV	$\sim$ 6.6 eV	1.68 eV	3.1 $\pm$ 0.3 eV
2.6 keV	113'' $\pm$ 3''	65''	$\sim$ 25''	28''	84'' $\pm$ 6''
	1.25 $\pm$ 0.03 eV	0.72 eV	$\sim$ 0.28 eV	0.31 eV	0.93 $\pm$ 0.07 eV

Table 6: *Les diverses contributions à la largeur mesurée et résolution instrumentale à 5.9 et 2.6 keV.*

En précision relative, ces résolutions instrumentales sont d'environ $5.3 \cdot 10^{-4}$ à 5.9 keV et $3.6 \cdot 10^{-4}$ à 2.6 keV. Remarquons que la contribution majeure diffère en fonction de l'énergie de la raie mesurée. A 5.9 keV la contribution des aberrations géométriques domine à cause du petit angle de Bragg correspondant (19.6°), alors qu'à 2.6 keV c'est la largeur naturelle de la raie $Cl(K_\alpha)$ qui contribue de façon prépondérante. Notre instrument semble donc plus précis à basse énergie.

La réflectivité intégrale a été mesurée pour $Cl(K_\alpha)$: elle vaut environ $3 \cdot 10^{-8}$. La valeur attendue (voir Table 3 au début du chapitre) est d'environ $7 \cdot 10^{-5}$, valeur qui est supérieure d'un facteur 2.3 à celle mesurée. Avec une largeur instrumentale de 84'', nous obtenons une réflectivité au pic d'environ 7 %.

Clairement, ces constatations ne s'appliquent que dans le cas d'un cristal unique. On peut prévoir que la juxtaposition de plusieurs cristaux va dégrader cette résolution. Le test regroupant l'ensemble des cristaux n'a pu être entrepris que lors de la calibration de l'instrument complet, sur le site d'expérience au PSI. Nous verrons dans la partie consacrée à cette calibration que la résolution finale (les 13 cristaux ensemble) demeure toutefois acceptable.

III Système de détection par CCD

III.1 Résumé

III.2 Description et principe de fonctionnement

III.3 Méthode d'analyse et réjection du bruit de fond

III.4 Tests des CCD à 5.9 keV et 2.6 keV

III.1 Résumé

La détection des rayons X au moyen de détecteurs solides du type CCD est une technique relativement récente et très prometteuse dans le domaine des basses énergies (1 à 10 keV), en particulier lors de mesures en présence de bruit de fond important. Dans cette situation, les CCD montrent en effet une très grande capacité à discriminer les rayons X du bruit de fond de particules chargées. Du fait de la nouveauté de l'application de ce genre de détecteur à la mesure de rayons X, il nous a semblé nécessaire de consacrer un chapitre particulier au CCD afin d'en présenter la constitution physique et le fonctionnement. Nous décrivons ensuite la méthode d'analyse des événements qui permet une réjection importante du bruit de fond, sans détecteurs auxiliaires (pas de coïncidences nécessaires). Nous terminons ce chapitre par la présentation des résultats obtenus en mesurant des rayons X de 5.9 keV et 2.6 keV.

III.2 Description et principe de fonctionnement

Les capteurs d'images intégrés (Charge-Coupled Device, CCD) sont apparus au début des années 70, utilisés essentiellement pour l'enregistrement d'images video-TV visibles et infrarouges. Ce n'est que plus tard que leur application dans le domaine de rayons X a été envisagée et, depuis le début des années 80, des CCD performants dans la région de 1 à 10 keV sont disponibles.

Nous nous limiterons ici à décrire les principales caractéristiques de ce type de détecteur dans le cadre de notre application. Le lecteur intéressé par une introduction générale pourra consulter la référence [77]. La mesure de rayons X de basse énergie est abordée en détail dans la référence [78] et la référence [79] présente le compte rendu d'une réunion internationale récente sur les applications des CCD pour la détection de particules et rayons X, ainsi que les développements futurs prévus pour ce type de détecteurs.

Parmi les différents types de CCD disponibles sur le marché, le modèle P8603 de GEC (fabriqué par EEV en Angleterre), nous a paru le mieux adapté à nos exigences. Il se présente sous la forme d'un circuit intégré dont la surface supérieure contient la zone sensible de détection.

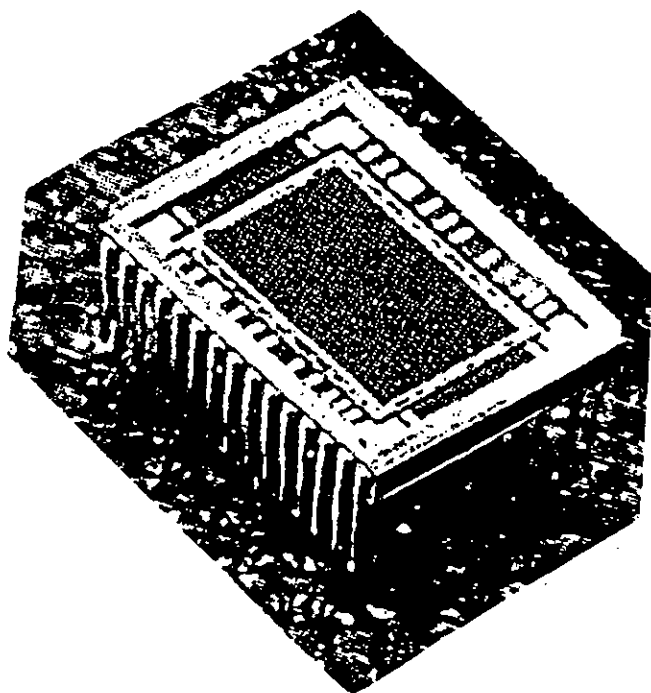


Figure 45: Photographie d'un CCD du type P8603 de GEC.

III.2.1 Caractéristiques générales

La surface de détection est constituée d'une matrice de 384×576 capteurs élémentaires appelés pixels (picture elements) de forme carrée de $22 \mu\text{m} \times 22 \mu\text{m}$ de côté. Ces dimensions correspondant à la résolution spatiale du CCD. Chaque pixel peut être assimilé à un microscopique détecteur au silicium. Il s'agit en fait d'une capacité MOS capable d'emmagasiner la charge créée lors de la photoabsorption d'un rayon X dans le substrat de silicium.

Le P8603 est un CCD à trois phases de tension du type "à canal enterré" (buried channel CCD), par opposition au type "à canal de surface" (surface channel CCD). La forme particulière du potentiel à travers le substrat permet à la charge produite de s'accumuler à l'intérieur de la zone dopée n de la région "déplétée" plutôt qu'en surface. Pour une description plus détaillée nous conseillons la référence [77]. La figure suivante représente une coupe schématique d'un pixel de CCD selon son épaisseur. La zone active pour la détection s'étend sur une profondeur de $25 \mu\text{m}$.

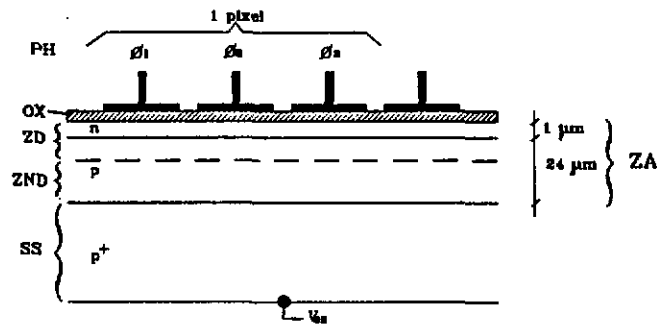


Figure 46: Coupe schématique d'un pixel de CCD. PH= phases; OX= oxyde; ZD= zone déplétée; ZND= zone non-déplétée; ZA= zone active; SS=substrat; Vss= tension de substrat.

Lorsqu'un photon est détecté, la charge générée est confinée dans un pixel grâce aux tensions ϕ_1 , ϕ_2 et ϕ_3 qui l'empêchent de diffuser sur un pixel adjacent. Le confinement latéral, entre les différentes colonnes de pixels adjacents, est obtenu par implantation de canaux isolants destinés à stopper la diffusion des électrons.

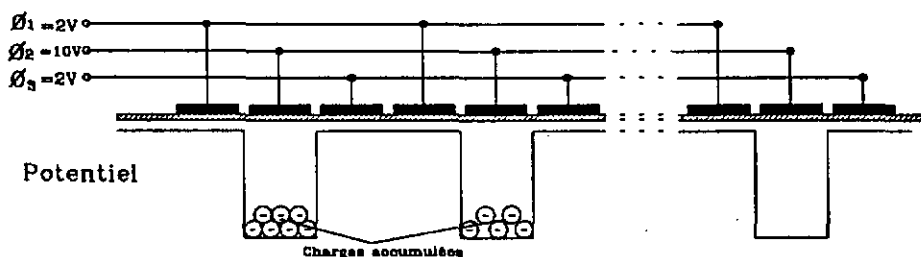


Figure 47: Confinement de la charge entre pixels adjacents.

III.2.2 Détection de rayons X

Nous avons déjà mentionné que la détection de rayons X résulte du processus de photoabsorption. Dans le cas du silicium, la création d'une paire électron-trou requiert une énergie de 3.6 eV, correspondant en moyenne à 278 paires créées par keV d'énergie radiative absorbée. La charge produite étant maintenue dans un pixel pendant toute la durée de l'exposition aux rayons X, il suffit alors d'attendre jusqu'à ce qu'une quantité raisonnable de pixels soient touchés avant d'effectuer la lecture du CCD. Si le temps d'acquisition n'est pas trop long, la probabilité pour qu'un pixel soit touché deux fois reste négligeable. On voit que la partie détection est d'une extrême simplicité: il suffit d'attendre, ainsi qu'on le ferait pour l'image latente sur pellicule photographique. La lecture équivaut simultanément à une remise à zéro, le CCD est alors prêt pour la mesure suivante.

La distribution bidimensionnelle de la charge accumulée sur le CCD correspond à la distribution spatiale de la radiation détectée. Le schéma simplifié ci-dessous représente le principe de mesure avec un CCD réduit à 4×4 pixels.

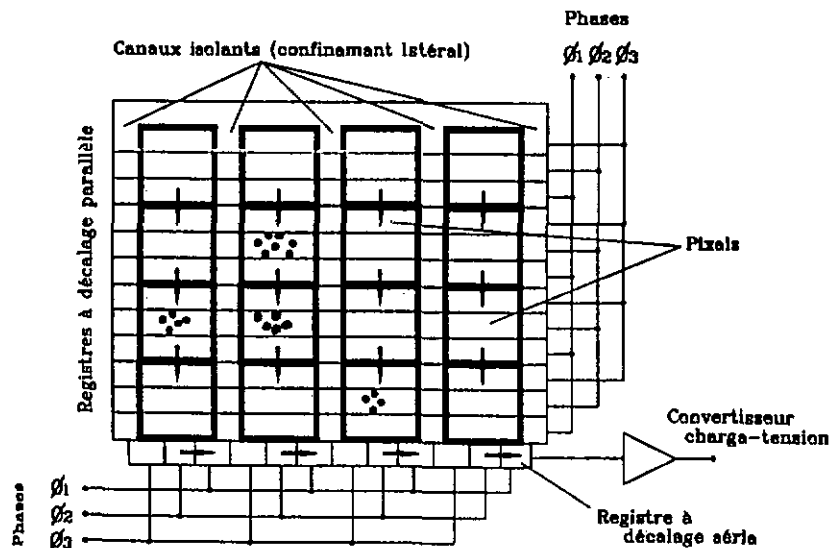


Figure 48: Exemple de distribution de quatre événements accumulés sur un CCD réduit à 4×4 pixels.

III.2.3 Méthode de lecture

L'image de la distribution spatiale des rayons X détectés est lue en faisant varier les trois phases de tension ϕ_1 , ϕ_2 et ϕ_3 , transférant le contenu de chaque pixel sur celui adjacent pour aboutir finalement sur un transistor de sortie qui convertit cette charge en une tension mesurable (voir réf. [80]). Ce convertisseur charge-tension se situe sur le même circuit intégré contenant le CCD (réalisation "on chip").

Le transfert s'effectue ligne par ligne, chaque ligne de pixels équivant alors à un registre à décalage parallèle. La première ligne est transférée dans un registre à décalage série à partir duquel le contenu de chaque pixel est transmis à l'amplificateur de charge en faisant varier les tensions ϕ_1 , ϕ_2 et ϕ_3 de façon semblable au transfert de lignes (voir figure).

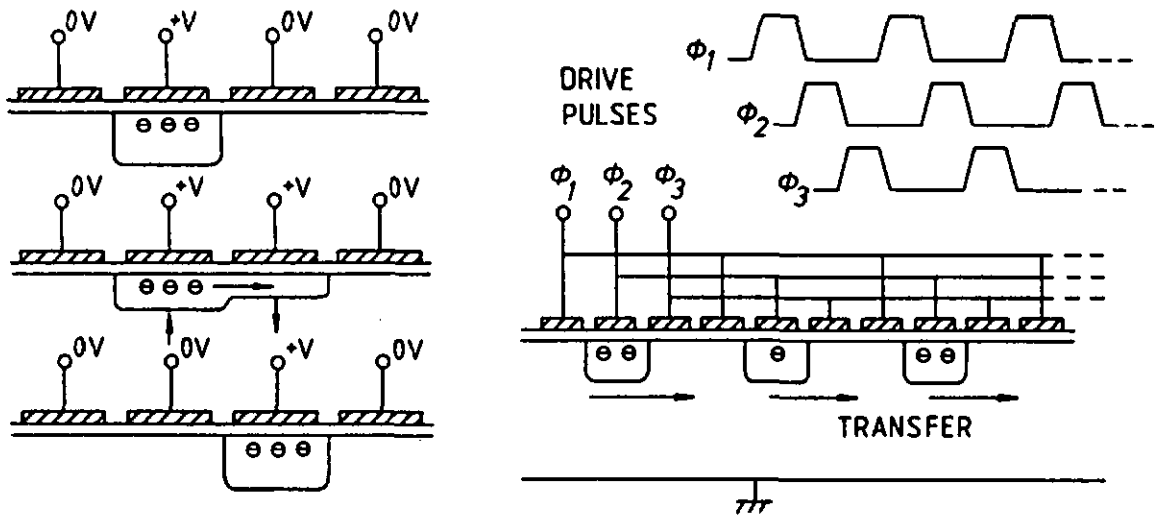


Figure 49: Représentation du processus de transfert de charge d'un pixel sur son voisin.

La tension correspondant à la charge détectée est ensuite traitée par un montage électronique et convertie en un nombre binaire par un convertisseur A/D à 12 bits. Ce nombre correspond à la quantité de charge détectée, donc à l'énergie déposée dans le pixel considéré.

Etant donné le nombre important de transferts à effectuer ($384 + 576 = 960$ transferts pour le pixel le plus éloigné de la sortie), il est absolument nécessaire que les phases soient très bien ajustées pour éviter des pertes de charge et l'introduction de bruit indésirable. Il n'y a pas de gain interne, de telle sorte que la résolution en énergie est essentiellement déterminée par le bruit du système.

Les caractéristiques intéressant en priorité l'expérimentateur sont la résolution en énergie et en position, ainsi que l'efficacité du détecteur qu'il utilise. Dans le cas des CCD la résolution en énergie est essentiellement déterminée par le bruit engendré lors de la mesure, bruit provenant de plusieurs sources distinctes qui sont discutées ci-dessous.

III.2.4 Bruit de grenaille (shot noise)

De par son caractère statistique, le processus de conversion des rayons X en photo-électrons engendre du bruit: le nombre n de paires électron-trou généré varie d'une quantité moyenne σ_n d'un événement à l'autre. Ce bruit intrinsèque est appelé *bruit de grenaille (shot noise)* et il est possible de calculer sa valeur. Nous avons donc pour le nombre total de paires créées:

$$n \pm \sigma_n \quad , \text{ où } \sigma_n = \sqrt{\frac{FE}{A}} \quad (79)$$

avec: E : énergie du photon absorbé;

A : facteur de conversion de charge (3.6 eV/paire pour le silicium);

F : facteur de Fano ($F = 0.12$). Il est défini comme étant le rapport de la variance observée à la variance de Poisson. Ce facteur tient compte du fait que la statistique à laquelle obéit le processus de génération de paires n'est pas exactement celle de Poisson. En effet, les paires e^- -trou qui apparaissent successivement ne sont pas créés de manière indépendante, la variance est donc modifiée (diminuée).

Pour un rayon X de 6 keV, $\sigma_n = 14 e^- rms$, représentant 0.9 % de la charge totale créée et équivalent à une résolution de 127 eV FWHM. Pour 3 keV, $\sigma_n = 10 e^- rms = 1.2$ % de la charge, équivalent à 85 eV FWHM.

Si le transfert des charges et le système électronique de lecture étaient parfaits, σ_n serait la meilleure résolution en énergie que l'on puisse espérer obtenir avec des CCD au silicium. La limitation ne proviendrait que du processus physique de détection lui-même. Dans les faits et pour un système réel, cette source de bruit contribue faiblement au bruit total.

III.2.5 Bruit thermique (dark current)

Le *bruit thermique (dark current)* provient de la génération aléatoire de charges par l'agitation thermique animant les atomes du substrat du CCD. A température ambiante cette source de bruit domine toutes les autres. Il est donc nécessaire de refroidir les CCD afin de réduire cette perturbation à un niveau tolérable. La courbe ci-dessous montre la dépendance en température du bruit thermique. Le comportement exponentiel de cette courbe est dû au processus physique de génération de charges: leur nombre dépend du facteur de Boltzmann qui fait intervenir l'énergie du gap ($N \sim \exp\left[-\frac{E_{gap}}{kT}\right]$). Nos CCD fonctionnent à une température de $-100^\circ C$ (173 K), correspondant à un bruit thermique d'environ $10^{-2} e^-/sec/pixel$. Cette valeur relativement basse nous autorise des temps d'acquisition de plusieurs heures.

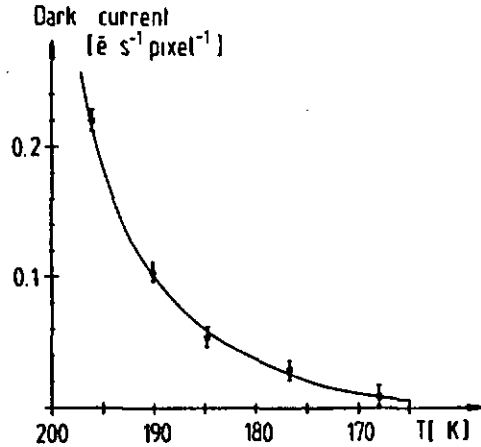


Figure 50: Dépendance en température du bruit thermique.

III.2.6 Bruit de transfert

Indépendamment du bruit thermique, le processus de transfert de charges d'un pixel à l'autre peut lui aussi engendrer du bruit par adjonction ou perte d'électrons. Nous l'appellerons *bruit de transfert*. Ici intervient la qualité de l'électronique de lecture: "propreté" des phases de tension et parfaite synchronisation de celles-ci garantissent une grande efficacité de transfert. Pour le système de lecture développé par nos électroniciens [80], cette efficacité vaut 99.997 %, rivalisant avec les meilleures réalisations actuelles à notre connaissance. Cette valeur très élevée de l'efficacité de transfert rend négligeable cette source de bruit comparativement à la suivante.

III.2.7 Bruit électronique

La dernière contribution au bruit de lecture provient de la conversion de la charge en tension à la fin du processus de transfert: il s'agit du *bruit électronique*. Il dépend d'une part de l'électronique intégrée (on chip) sur le circuit du CCD, d'autre part de la partie (off chip) de mise en forme et traitement du signal détecté. Des informations détaillées sur l'origine de ce bruit sont données dans la référence [80].

La valeur du bruit électronique obtenue pour la partie "off chip" est de $6 e^- rms$, équivalent à une résolution de $108 eV FWHM$ [80]. Lorsque le CCD est inclus dans le circuit de mesure, cette valeur augmente pour atteindre $9.3 e^- rms$ ($162 eV FWHM$).

III.2.8 Résolution en énergie

Théoriquement (voir réf. [78]), les limites intrinsèques de ce type de CCD permettent d'espérer au mieux une résolution d'environ $100 eV FWHM$, indépendamment de l'énergie du rayonnement détecté.

La mesure de la raie K_α de l'argon (2957 eV) avec un CCD P8603 refroidi à -100°C montre une résolution en énergie de 172 eV *FWHM* pour notre système [80]. Une telle résolution est comparable avec les meilleurs détecteurs Si(Li) actuels.

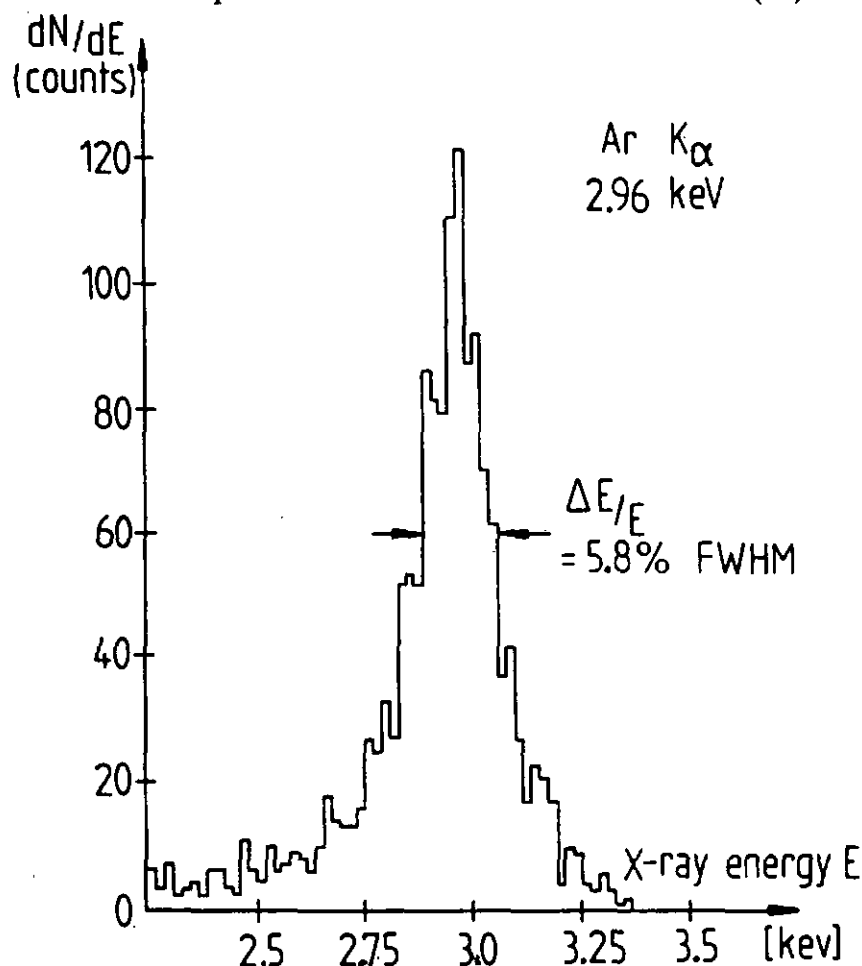


Figure 51: *Mesure de la raie $Ar(K_\alpha)$ de 2957 eV, $FWHM = 172 \text{ eV}$.*

En résumé, on peut dire que les CCD sont des détecteurs offrant naturellement une excellente résolution spatiale bidimensionnelle et une résolution en énergie équivalente à celle des meilleurs détecteurs solides actuels. Leur efficacité de détection est optimale autour de 2.5 keV. De plus, on verra plus loin que leur fragmentation intrinsèque en pixels distincts les rend aptes à pouvoir discriminer entre un rayonnement X et d'autres rayonnements. Par contre, ce type de détecteur à image latente ne se prête pas à des mesures de coïncidences. Mais ce désavantage paraît bénin en regard des possibilités et de la simplicité d'utilisation qu'il offre.

Le problème de l'efficacité, volontairement éclipsé ici, sera abordé dans la troisième partie de ce chapitre, consacrée aux tests.

III.3 Méthode d'analyse et réjection du bruit de fond

Avec un CCD, la prise de données est très simple: il suffit de le vider des charges qu'il contient et d'attendre que soient collectés suffisamment d'événements. Par contre, l'analyse de ces données n'est pas aussi évidente. Il importe de comprendre la manière avec laquelle l'énergie d'un rayon X est répartie dans le détecteur afin de pouvoir identifier l'événement correspondant.

III.3.1 Topologie des événements

L'analyse en énergie de la topologie des événements détectés nous fournit une méthode de discrimination entre rayons X de basse énergie et particules chargées ou radiations de plus haute énergie.

Ainsi que nous le verrons dans la partie consacrée aux tests, il est apparu que dans la majorité des cas (60 à 70%), l'énergie des rayons X entre 2 et 3 keV est déposée dans un *seul pixel*. Les 30 à 40% restant sont des événements pour lesquels la charge libérée par l'absorption du photon a pu diffuser sur 2 ou plusieurs pixels et apparaissent à l'analyse sous forme de groupement de pixels contigus.

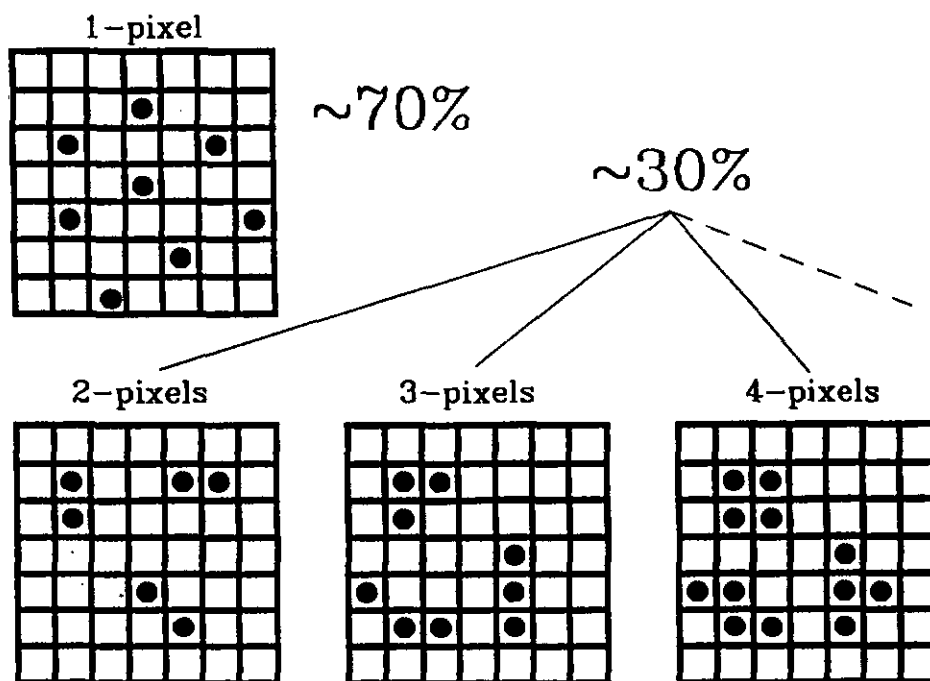


Figure 52: Exemple des différents types d'événements apparaissant sur le CCD.

Dans le cas des événements "dispersés", la charge collectée dans chaque pixel ne correspond qu'à une fraction de celle engendrée par le photon incident et dans un spectre en énergie (fig. 53) ils apparaissent dans des canaux d'énergie inférieure à celle de la particule initiale.

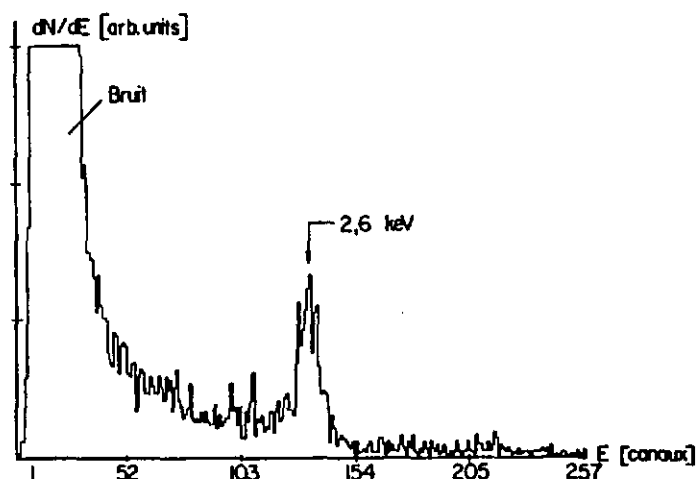


Figure 53: Spectre en énergie typique de rayons X de 2.6 keV tel qu'on l'obtient après une lecture "brute" du CCD, sans traitement des événements.

III.3.2 Reconstruction des événements dispersés

Par ordinateur, il est possible de "reconstruire" les événements dispersés. Il suffit de considérer les différents groupements de 2, 3 ou 4 pixels en exigeant que le contenu des pixels extérieurs contigus soit inférieur au seuil de bruit, seuil qu'il s'agit de déterminer auparavant. On admet alors que ces pixels périphériques, externes au groupement, sont vides. Ils définissent la position et la taille de la collection de pixels qu'ils entourent. L'étape suivante consiste à sommer la part d'énergie contenue dans chacun des pixels du groupe et si l'énergie sommée correspond à celle du rayon X incident, alors le groupement tout entier est pris en compte en tant que "bon" événement.

Nous avons délibérément ignoré les groupements de plus de 4 pixels dans notre analyse. D'une part, l'éventualité de tels cas paraît fort improbable dans le domaine de 3 keV et, d'autre part, l'analyse en aurait été rendue plus longue et difficile pour un bénéfice réduit. Au contraire, c'est justement cette limitation à des événements répartis sur au maximum 4 pixels, associée à l'exigence que l'énergie sommée corresponde à celle du photon détecté, qui fournit une méthode extrêmement puissante de réjection du bruit de fond. Bruit de fond qui est dû essentiellement à des particules chargées.

III.3.3 Réjection du bruit de fond

Si les rayons X de basse énergie donnent lieu à des événements répartis sur peu de pixels, les particules chargées signent leur passage par des longues traces ou des gros groupements car leur énergie est bien supérieure dans la presque totalité des cas. En effet, la perte d'énergie peut être estimée à l'aide de la formule $\Delta E \cong \left(\frac{dE}{dx}\right)_{\min} \cdot \Delta x \gg 2.5 \text{ keV}$. Il faut donc beaucoup plus de matière (Δx grand) pour absorber l'énergie de ces particules. L'image ci-dessous est explicite.



Figure 54: Image obtenues avec un CCD exposé à des rayons X de 2.9 keV (gauche) et à des rayons X + bruit de fond de particules chargées (droite).

Les caractéristiques requises pour qu'un événement dispersé soit considéré comme "bon" sont si contraignantes, que la majeure partie de ceux dus au bruit de fond est immédiatement éliminée. Nous pourrions mieux apprécier les possibilités de réjection du bruit dans la partie consacrée aux tests.

III.3.4 Utilisation d'un ordinateur

Il est clair que le grand nombre de pixels à analyser ($384 \times 576 = 2.2 \times 10^5$) rend obligatoire l'utilisation d'un ordinateur. Nous avons pu disposer pour ce faire d'un IBM PS/2 80, muni de coprocesseur et du programme d'analyse décrit dans la référence [80]. Malgré la puissance de la machine, il s'est avéré que le temps d'analyse, dû à la très grande quantité d'information à traiter ($440 \text{ kBytes/mesure/CCD}$), reste le point faible du système. En effet, pour éviter la saturation du CCD lorsque le taux d'événements est important, il faut lire et vider fréquemment la matrice de pixels. Il en va de même lorsque le taux d'événements "intéressants" est faible par rapport à celui du bruit de fond: il faut éviter que ces événements soient noyés dans le bruit, d'où de fréquentes lectures du CCD. Le nombre de fichiers à analyser devient alors rapidement prohibitif.

Le phénomène de saturation survient lorsque beaucoup d'événements dont l'énergie est supérieure au seuil de bruit occupent une grande partie de la surface du CCD. Dans ce cas, la probabilité de trouver des pixels ou groupements de pixels isolés s'amenuise rapidement pour devenir très faible. Il reste de moins en moins de place pour que ces "bons" événements soient effectivement isolés et puissent être reconnus comme tels. D'où cette nécessité de lire fréquemment la matrice de pixels pour ne pas perdre trop d'efficacité.

III.4 Tests des CCD à 5.9 keV et 2.6 keV

Pour les tests de mise au point nous avons utilisé une source Fe^{55} émettant la raie $Mn(K\alpha)$ de 5.9 keV avec une activité de l'ordre de la dizaine de mCi . La raie à 2.6 keV a été produite par fluorescence d'un morceau de PVC avec la source précédente. La raie correspondante est la $Cl(K\alpha)$. Le bruit de fond était simulé par des particules chargées (β^-) issues d'une source Sr^{90} , par du rayonnement γ (1.17 et 1.33 MeV) émis par une source de Co^{60} et par les neutrons de la source Cf^{252} .

III.4.1 Appareillage

Lors des premières mesures nous disposions d'une version simplifiée de l'appareillage ne pouvant accepter qu'un seul CCD à la fois. La version définitive permet d'en utiliser 3 simultanément. La construction initiale a servi de banc d'essai pour la mise au point du prototype du système électronique de lecture, ainsi que pour la manipulation des CCD, montage et démontage, celle-ci s'avérant fort délicate. En effet, le risque est élevé de détruire ces circuits MOS par des décharges électrostatiques ou de salir leur surface non protégée, provoquant ainsi des courts-circuits.

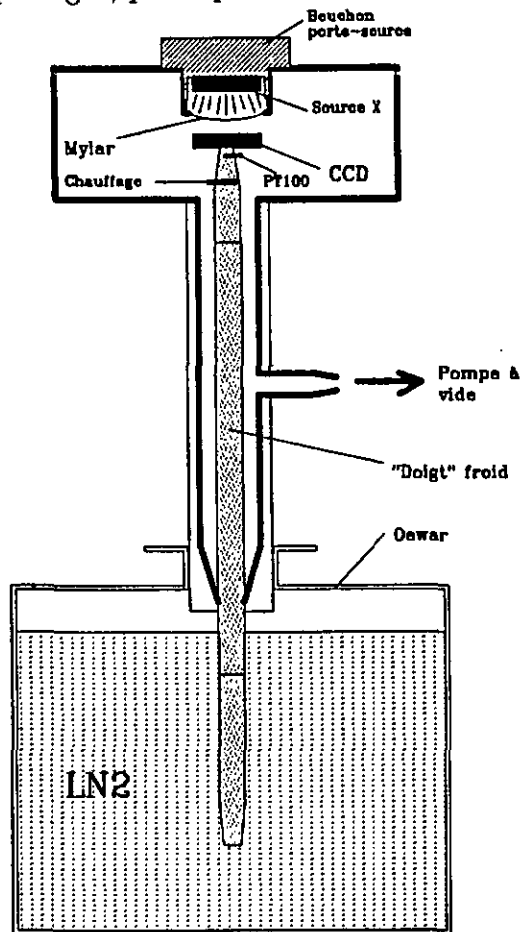


Figure 55: Schéma du banc d'essai utilisé pour la mise au point des prototypes mécanique et électronique.

La figure 55 montre le schéma de l'assemblage mécanique supportant le CCD. Le détecteur est placé sous vide et isolé de l'atmosphère extérieure par une fenêtre mince en mylar $25\text{ }\mu\text{m}$, atténuant modérément l'intensité des rayons X qui la traversent. Une cavité au-dessus de cette fenêtre permet de contenir les différentes sources de radiations. Un couvercle hermétique protège le CCD de la lumière, empêchant toute contamination des mesures par des photons visibles. Nous avons effectivement constaté une sensibilité extrême des CCD à la lumière, nous obligeant à les placer dans l'obscurité la plus totale pour rendre possible nos mesures.

La mise sous vide s'est révélée nécessaire, car le CCD étant refroidi à -100°C , la condensation de la vapeur d'eau à sa surface l'aurait détérioré. Le refroidissement est obtenu au moyen d'un "doigt froid" en cuivre, s'appuyant sur l'arrière du CCD et plongeant dans un dewar rempli d'azote liquide. Un système simple de régulation de température trouve sa place près du socle du détecteur: il s'agit d'une résistance dissipant sous forme de chaleur l'énergie d'un courant d'intensité réglable. La température est déterminée par la mesure de la résistance d'une sonde au platine PT100.

La partie électronique associée au CCD est décrite en détail dans la référence [80]. Nous nous limiterons à en rappeler les principales composantes, symbolisées dans le schéma suivant:

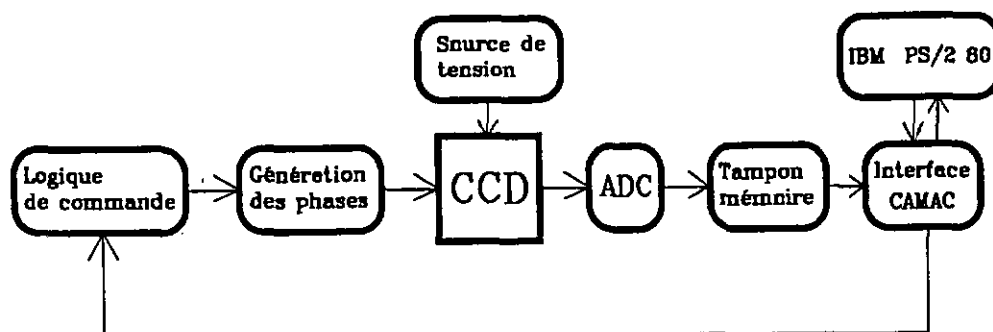


Figure 56: Schéma-bloc de l'électronique associée au CCD.

Le CCD est alimenté par une source de tension stabilisée. Un circuit électronique spécifique génère les phases de tensions qui assurent le transfert des charges entre les différents pixels. Ces phases sont déclenchées par une logique de commande. À la sortie du CCD, la tension correspondant à la charge de chaque pixel est convertie en donnée numérique au moyen d'un ADC. Ce nombre est ensuite stocké dans une mémoire tampon en attendant son traitement. Finalement, un système CAMAC assure l'interface de communication entre l'ordinateur IBM PS/2 80 et le reste du circuit électronique.

Nous tenons à relever l'excellent travail effectué par D. Varidel et D. Schenker, électroniciens de l'Institut de Physique, qui ont développé et réalisé ce système de lecture des CCD.

III.4.2 Détection de rayons X de 5.9 et 2.6 keV et résolution en énergie

L'intensité des sources utilisées permettait de nous limiter à des temps de mesure de quelques minutes, voire quelques dizaines de secondes. L'irradiation était pratiquement uniforme sur le CCD de telle sorte que les spectres en position n'exhibaient qu'un plateau inintéressant. Par contre, l'information en énergie est très instructive: les figures 57 et 58 représentent les spectres en énergie obtenus avant et après analyse.

La figure 57 (a) montre un spectre brut à 5.9 keV où on reconnaît à gauche le pic de bruit électronique (amplitude réduite 110 fois), contenu minimal de chaque pixel. A droite du pic de bruit apparaît le pic à 5.9 keV de $Mn(K_\alpha)$. A droite de ce dernier, on voit poindre le pic K_β à 6.5 keV.

Ainsi que nous le mentionnions plus haut, le remplissage de l'intervalle séparant le bruit du pic est dû aux événements dispersés sur plusieurs pixels dont le contenu en charge est inférieur à celui correspondant à 5.9 keV.

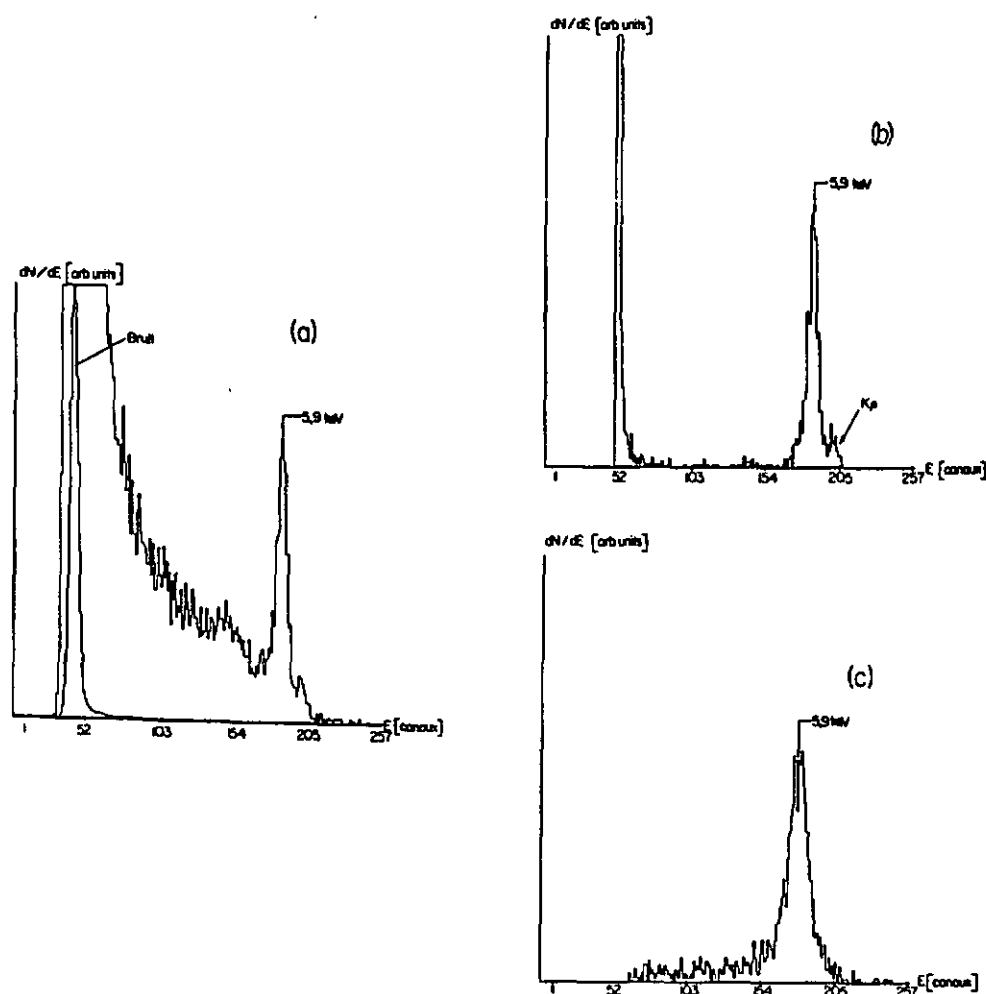


Figure 57: Spectre en énergie de rayons X de 5.9 keV: (a) brut; (b) sans les événements dispersés; (c) événements sur 2, 3 et 4 pixels.

La figure 57 (b) montre ce qu'il reste après avoir exigé que les événements pris en considération soient issus de pixels isolés. Pour cela, il a fallu définir le terme "isolé" à l'aide d'un seuil fixant la limite du bruit. Ce seuil est calculé au moyen d'une formule empirique afin d'obtenir la meilleure "efficacité d'analyse". Il est donné par:

$$S_{\text{bruit}} = \Gamma_{\text{bruit}} \times F_{\text{CCD}} + \text{offset} \quad (80)$$

où: S_{bruit} est le seuil cherché;

Γ_{bruit} est la largeur $FWHM$ du pic de bruit;

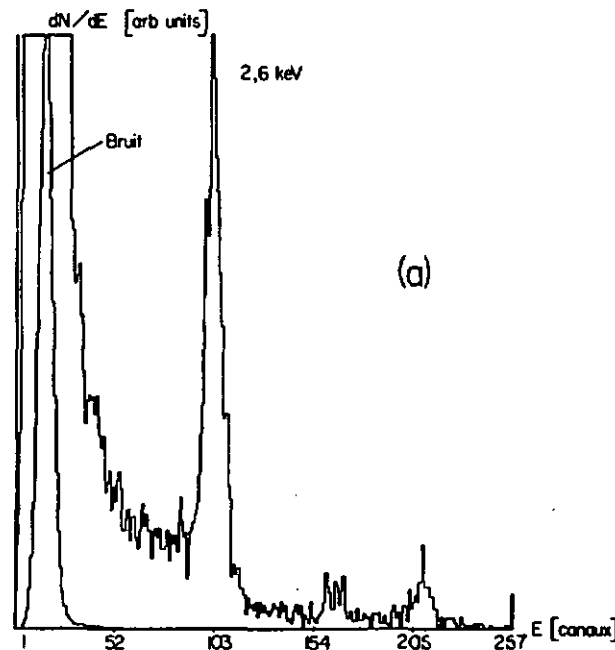
offset est la centroïde du même pic;

F_{CCD} est un facteur empirique, constant pour un CCD donné, mais variable d'un CCD à l'autre.

La figure 57 (c) représente le spectre en énergie des événements reconstruits à partir de 2, 3 et 4 pixels. Un pic apparaît très clairement à l'endroit attendu avec une largeur supérieure au précédent. Ceci s'explique par le caractère statistique des processus de dispersion et reconstruction. A noter qu'aucune "fenêtre en énergie" n'a été nécessaire dans cette analyse.

Les spectres mesurés pour la raie $Cl(K_\alpha)$ de 2.6 keV ne diffèrent guère des précédents, excepté dans la position du pic et par le fait que des pics voisins de faible intensité trahissent la présence de la source Fe^{55} (5.9 keV). Cette dernière produit par fluorescence la raie $Cl(K_\alpha)$ ainsi que d'autre raies.

L'analyse de cette mesure a été menée de manière semblable à la précédente.



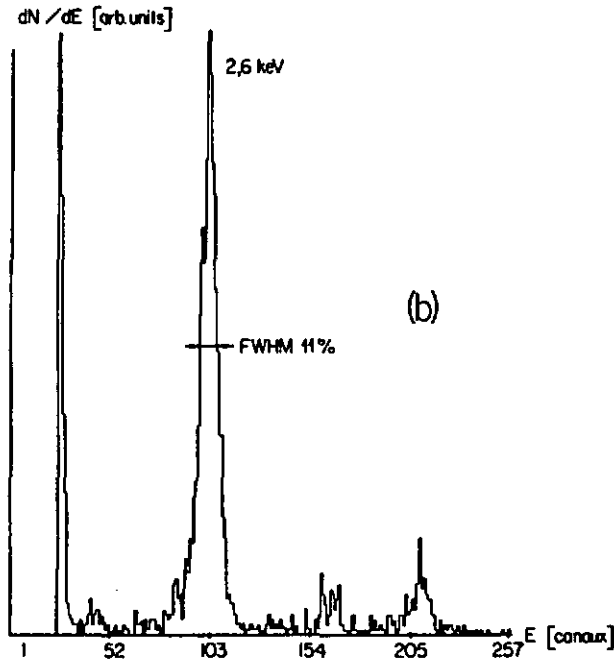


Figure 58: Spectre en énergie de rayons X de 2.6 keV: (a) brut; (b) élimination des événements dispersés.

Les résolutions en énergie se déduisent immédiatement des spectres et le tableau suivant résume les résultats obtenus aux deux énergies.

<i>Raie X mesurée</i>	<i>FWHM Événements isolés</i>	<i>FWHM Événements dispersés</i>
<i>Mn</i> (K_{α}) 5.9 keV	325 eV (5.5%)	650 eV (11%)
<i>Cl</i> (K_{α}) 2.6 keV	288 eV (11%)	525 eV (20%)

Table 7: Résolution en énergie (FWHM) des CCD à 5.9 et 2.6 keV.

On remarquera la perte d'un facteur ~ 2 dans la résolution lorsque les événements sont dispersés.

III.4.3 Répartition des événements

La répartition des événements sur 1 ou plusieurs pixels est une caractéristique importante du CCD. Elle permet de calculer correctement son efficacité pour l'énergie considérée en sommant les diverses configurations possibles. Nous avons effectué cette analyse pour les 2 sources X à disposition.

La définition d'un groupement de pixels d'une certaine taille repose sur la notion de seuil qui fixe la limite entre le "vide" et le "non-vide" pour un pixel. L'identification d'un groupe de pixels d'une taille donnée est réalisée si:

- le nombre voulu de pixels adjacents contient une charge supérieure au bruit;
- aucun autre pixel entourant ce groupe n'émerge du bruit;
- dans le cas où l'on s'intéresse à un domaine limité en énergie, on exige encore que la somme des contenus des pixels appartenant au groupe soit comprise dans le domaine considéré.

Il est donc très important de déterminer correctement le seuil, ou plus exactement le facteur F_{CCD} intervenant dans la formule empirique précédente. Pour ce faire, il suffit de répéter l'analyse d'une mesure en variant le seuil jusqu'à obtenir un maximum dans le nombre total d'événements détectés. Le nombre total d'événements est obtenu en additionnant les événements pour les groupes de 1, 2, 3 et 4 pixels. Les résultats pour 5.9 keV et 2.6 keV sont reportés sur les graphiques ci-dessous:

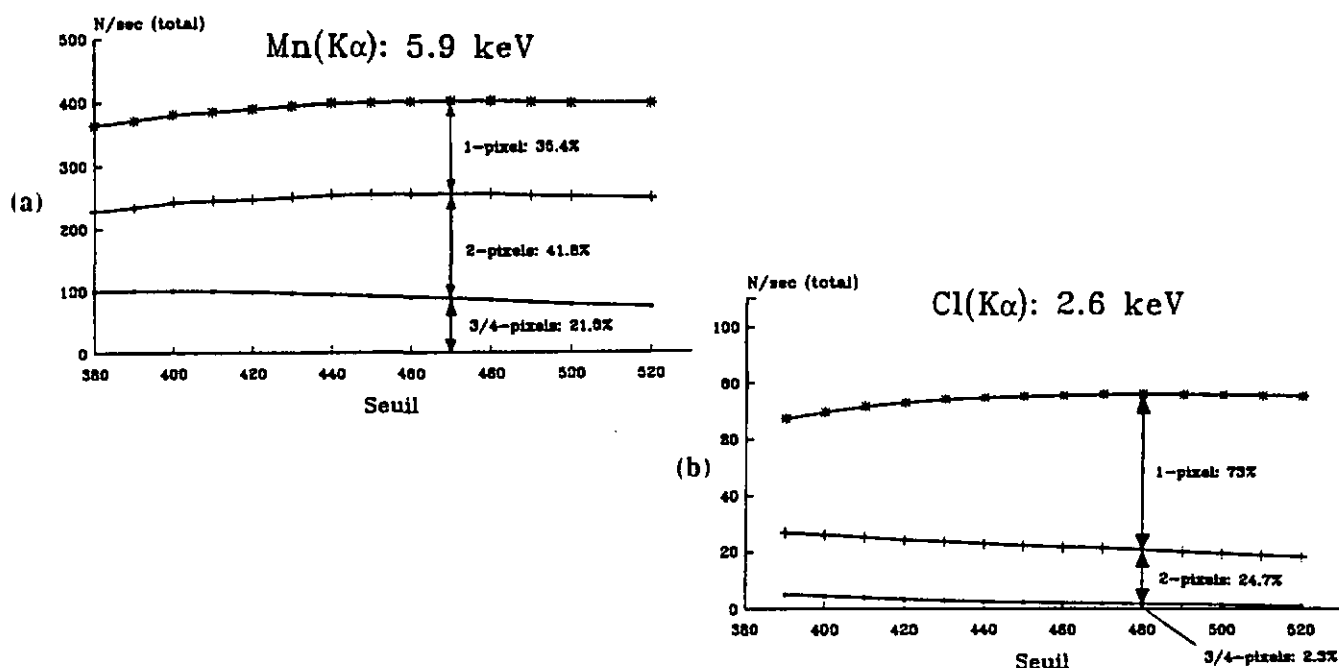


Figure 59: Répartition des événements en fonction du seuil pour: (a) 5.9 keV et (b) 2.6 keV.

On voit que le choix correct du seuil détermine l'efficacité d'analyse: un seuil trop bas diminue le nombre d'événements car les pixels ou groupes de pixels sont de moins en moins isolés; un seuil trop haut "coupe" les groupes, d'abord de 4, puis de 3 et 2 pixels car le contenu d'un ou plusieurs pixels ne dépasse plus la limite du seuil. Cet effet est manifeste sur la figure 59 où l'on constate qu'à partir d'un certain seuil, le nombre d'événements du type "3/4-pixels" et "2-pixels" diminue, alors que le nombre total est pratiquement constant. Nous avons défini le meilleur seuil comme étant la valeur inférieure pour laquelle le nombre total d'événements est pratiquement maximal.

Cette analyse fournit un autre résultat: elle donne, en fonction de l'énergie et pour le seuil choisi, la quantité relative d'événements de chaque type, alors que leur somme permettra de calculer l'efficacité du CCD. Le tableau suivant montre la proportion relative de chaque type d'événements pour les deux énergies considérées.

<i>Raie X</i>	<i>1 – pixel</i>	<i>2 – pixels</i>	<i>3/4 – pixels</i>
<i>Mn (K_α) 5.9 keV</i>	36%	42%	22%
<i>Cl (K_α) 2.6 keV</i>	73%	24.7%	2.3%

Table 8: *Distribution relative par type d'événements à 5.9 et 2.6 keV.*

Comme on pouvait s'y attendre, nous constatons qu'à plus basse énergie la charge créée par photoabsorption diffuse sur moins de pixels.

Par commodité, les événements "3-pixels" et "4-pixels" ont été regroupés. Remarquons en outre qu'à basse énergie les événements "d'ordre supérieur à 4" représentent certainement une quantité négligeable, ce qui justifie notre décision de les ignorer purement et simplement dans l'analyse.

III.4.4 Efficacité

L'efficacité intrinsèque (physique) du CCD est d'une part déterminée par l'interaction rayons X-silicium, d'autre part par la constitution du CCD. Le P8603 possède une zone active de 25 μm seulement (réf. [79]), ce qui explique la chute très rapide de l'efficacité lorsque l'énergie augmente au delà de 6 keV: l'épaisseur n'est plus suffisante pour arrêter les photons. Aux énergies inférieures à 3 keV la présence d'électrodes et d'une couche d'oxyde à la surface du CCD est responsable de la chute d'efficacité à basse énergie.

D'autre part, des recombinaisons de charges ou des pertes par diffusion hors des zones de capture sont possibles en fonction de l'endroit où a lieu l'absorption, ce qui diminue encore l'efficacité de détection.

Malgré cela, la valeur prédite d'environ 60 % (voir fig. 60 et réf. [78]) dans le domaine de 3 keV reste satisfaisante. Nous avons nous-mêmes mesuré cette efficacité à 5.9 et 2.6 keV en fonction du nombre d'événements détectés. Cette mesure a été réalisée à l'aide d'un détecteur proportionnel à argon, dont l'efficacité connue [73] a servi de référence. Les valeurs obtenues sont reportées sur la figure 60, ainsi que la courbe prédite (réf. [78]) pour un CCD équivalent du même fabricant. On constate une très bonne concordance.

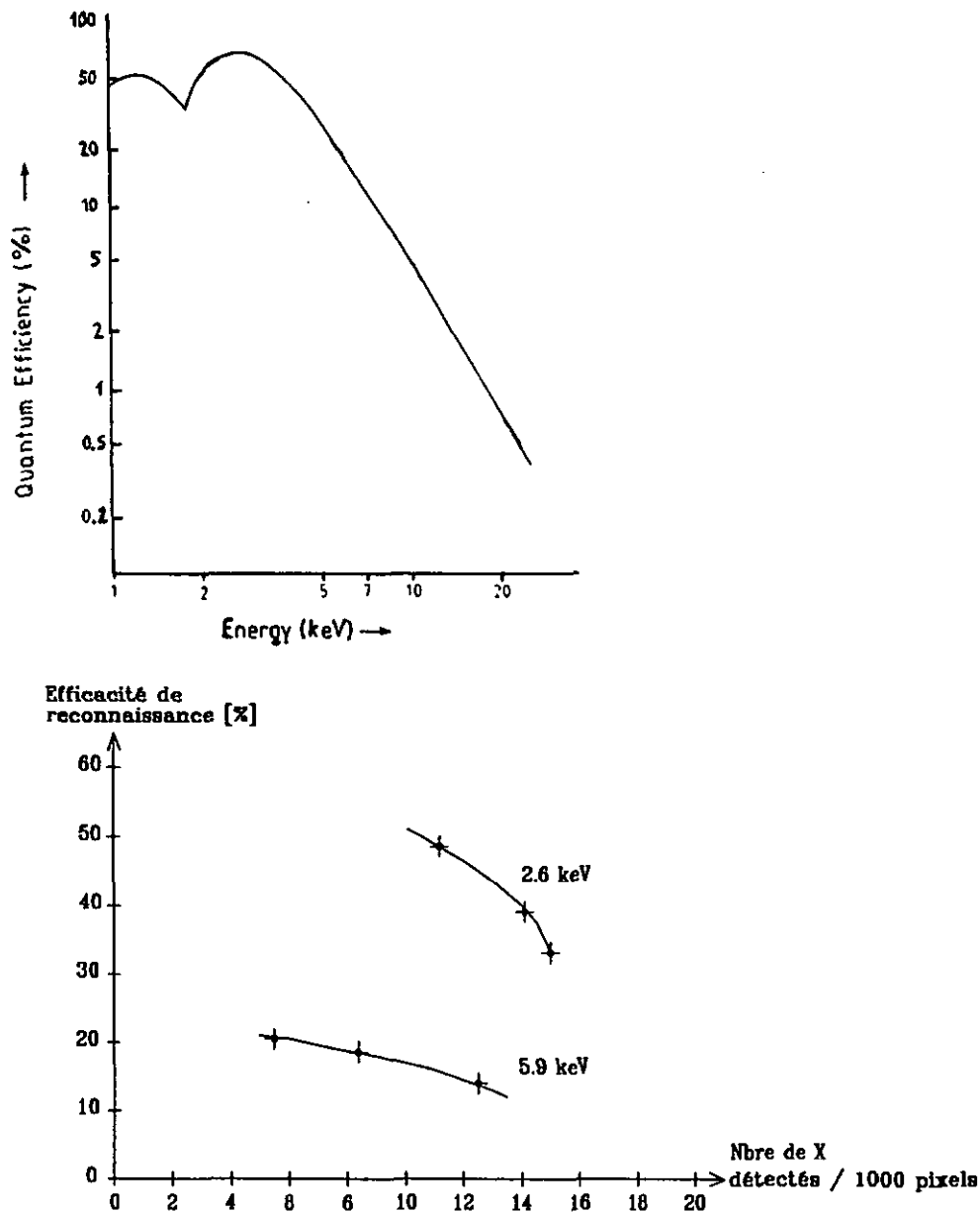


Figure 60: Efficacité prédite en fonction de l'énergie des rayons X (en haut) et mesurée en fonction du nombre d'événements (en bas).

Nous pouvons considérer qu'une efficacité d'environ 60% à 3 keV et d'environ 20% à 5.9 keV sont des valeurs raisonnables. Dans un proche futur, des CCD possédant une zone active plus épaisse devrait être disponibles. Ceux-ci semblent très prometteurs dans le sens d'une augmentation substantielle d'efficacité entre 1 et 10 keV (réf. [78]).

Deux effets peuvent dégrader cette efficacité intrinsèque: il s'agit d'une part de "l'efficacité d'analyse", déjà abordée dans le §III.4.3, et du rôle important d'un choix correct du seuil de bruit; d'autre part, *l'effet de saturation* peut dégrader ce que nous appellerons "l'efficacité d'acquisition". Cet effet a été brièvement décrit dans le §III.3.4 ci-dessus. Le remède consiste à lire fréquemment la matrice de pixels du CCD, avec tous les inconvénients que cela comporte.

Il nous a été difficile de juger de la linéarité de la réponse en énergie avec seulement 2 points à disposition, mais elle semble très bonne, comme le confirment d'autres mesures (réf. [78]).

III.4.5 Caractéristiques du bruit de fond

Pour étudier les caractéristiques d'un bruit de fond résultant de différentes radiations, nous avons utilisé les sources β^- , γ et *neutrons* citées au début de ce chapitre. Il apparaît dans les spectres mesurés et analysés, que même si initialement les rayonnements sont différents, ils sont finalement détectés sous forme de particules chargées, laissant des traces ionisantes lors de leur passage. Le fait qu'on ne détecte que des particules chargées n'étonne guère: les *gammas* donnent naissance à des électrons Compton et les *neutrons*, absorbés par les noyaux de Si, produisent des électrons de conversion et des *gammas*.

Les figures suivantes montrent les spectres en énergie obtenus pour les différentes sources, ainsi que les résultats de l'analyse.

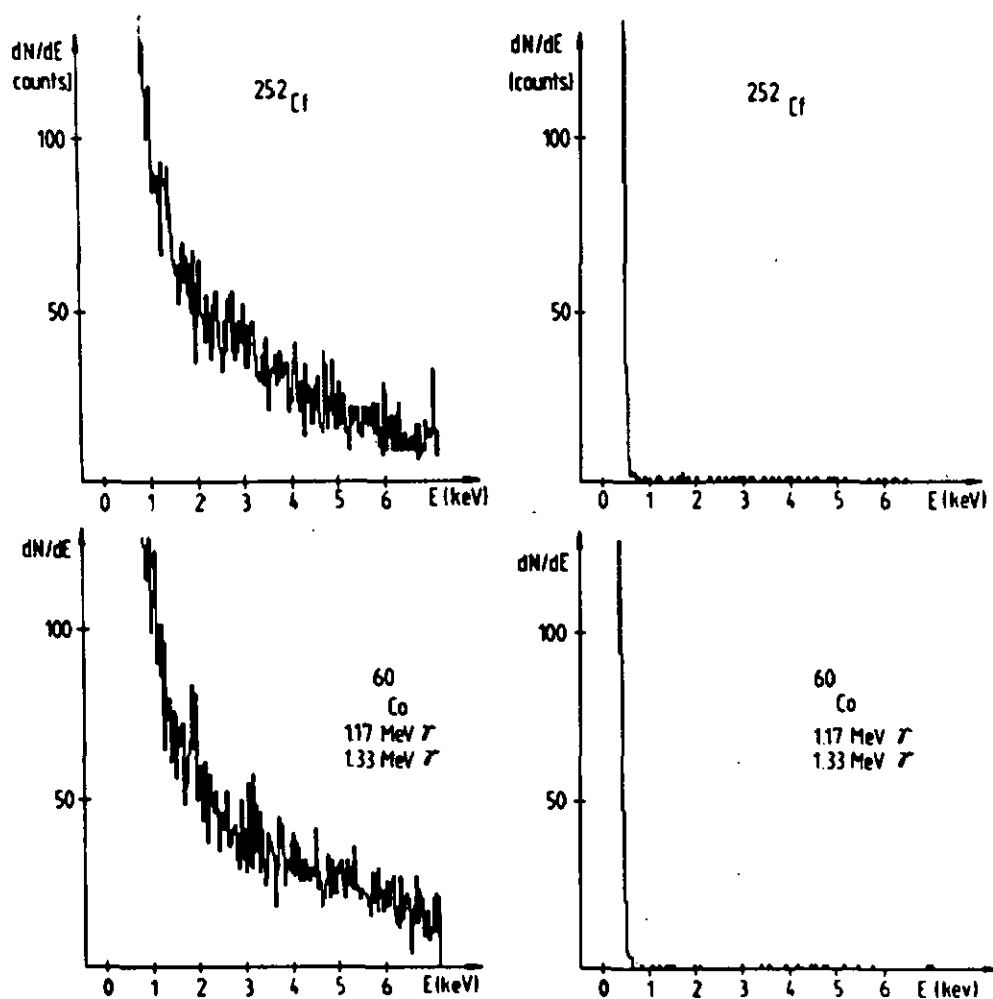


Figure 61: *Bruit de fond simulé. Haut: source de neutrons; bas: source γ .*

On constate que la méthode d'analyse décrite plus haut est extrêmement efficace et permet de réduire le bruit de fond sur des ordres de grandeur. Ceci sera confirmé lors des mesures finales dans les conditions réelles.

A titre d'illustration, et pour conclure ce chapitre, nous reproduisons ci-dessous deux clichés illustrant la topologie des événements enregistrés sur un CCD mesurant la raie de calibration $Ar(K_\alpha)$ à 2957 eV . L'image de gauche montre le résultat brut, alors que celle de droite montre l'effet de l'analyse: le bruit de fond est presque entièrement supprimé. La majeure partie des événements est détectée sur un seul pixel.

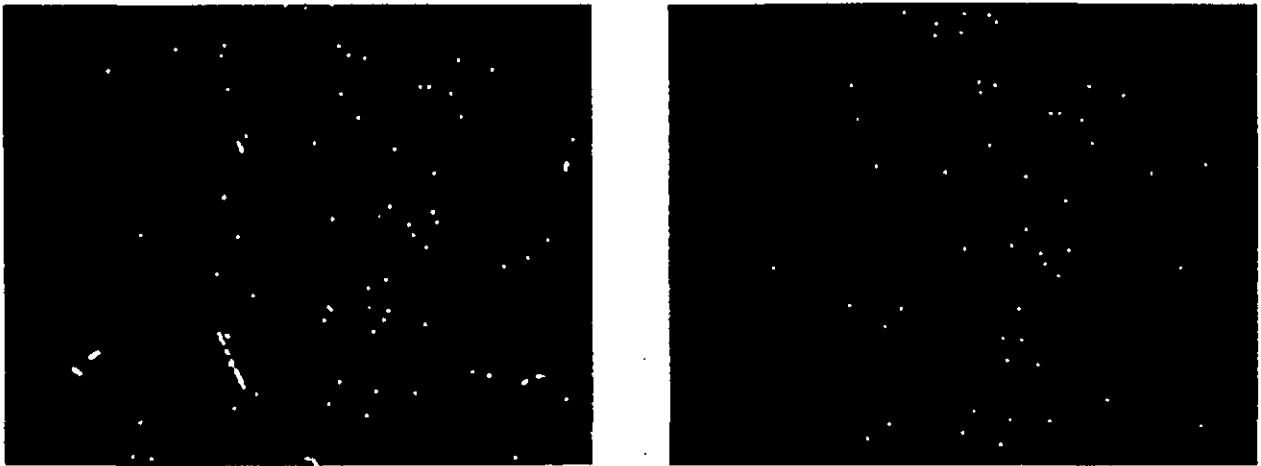


Figure 62: *Illustration de la topologie des événements obtenus en mesurant la raie de calibration $Ar(K_\alpha)$. A gauche: résultat brut; à droite: ce qu'il reste après analyse.*

IV Mesures et analyses

IV.1 Résumé

IV.2 Système de mesure et appareillage

IV.3 Acquisition des données — Analyses et résultats

IV.1 Résumé

Initialement, nous avons prévu de mesurer la transition $2P-1S$ dans l'hydrogène pionique, mais l'absence de lignes de calibration suffisamment proches de cette raie nous a contraint à choisir la transition $3P-1S$. Cette mesure a été réalisée dans l'aire expérimentale $\pi E3$ du *Paul Sherrer Institut* (PSI) à Villigen durant les mois de mars et avril 1989. Une première série de mesures l'avait précédée en novembre et décembre 1988 dans le but d'optimiser les conditions d'expérience avec le faisceau de pions à disposition. Une troisième série de mesures a suivi en novembre et décembre 1989 dans le but de confirmer par une meilleure statistique les résultats obtenus. Cette expérience devrait trouver son épilogue en 1992 par une mesure finale avec un nouveau faisceau pionique actuellement en développement. Un rapport intermédiaire résumant les mesures de novembre 1988 à décembre 1989 et présentant les projets pour 1992 peut être consulté [81].

Dans l'exposé qui suit, seules les deux premières séries de mesures seront abordées, et plus particulièrement l'expérience de mars-avril 89 qui fait l'objet de la présente thèse. La première partie de ce chapitre est consacrée à la description de l'appareillage qui se compose des éléments suivants: le système de production de rayons X, les cristaux avec leur mécanisme d'orientation et le système de détection. Cette partie se termine par l'exposé de la méthode de détermination de $\pi^-H(K_\beta)$. La seconde partie traite des mesures: calibration, contrôle de la stabilité instrumentale, mesure de la transition $\pi^-H(K_\beta)$ et analyse du bruit de fond. La détermination du déplacement d'interaction forte ϵ_{1S} s'ensuit et le chapitre se conclut par l'exposé des excellents résultats obtenus par une mesure directe des rayons X issus de la source π^-H .

IV.2 Système de mesure et appareillage

Le système de mesure que nous avons installé dans l'aire $\pi E3$ du PSI se compose essentiellement de trois parties distinctes, représentées dans le schéma ci dessous.

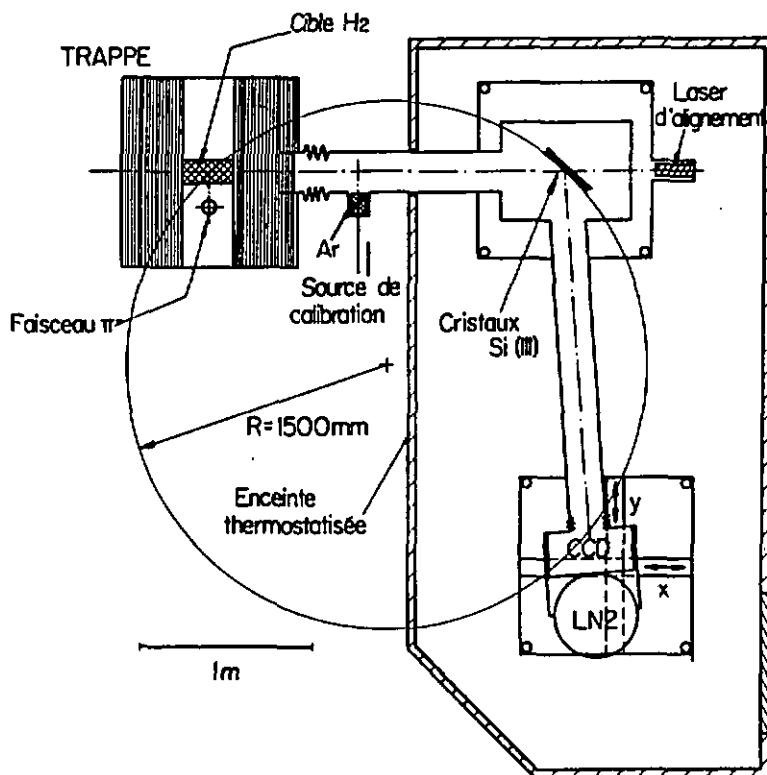


Figure 63: Schéma de principe général du spectromètre.

A gauche, nous trouvons la partie "production" de $\pi^- H$ et rayons X , ainsi qu'une source de calibration; lui faisant suite, la partie "diffraction" du spectromètre, avec l'assemblage des 13 cristaux de Si(111); finalement, la partie "détection", avec les détecteurs CCD posant sur le chariot d'une table de machine-outil qui permet des déplacements bidimensionnels précis.

La cible d'hydrogène, les cristaux et les CCD se trouvent sur un cercle de Rowland de 1500 mm de rayon. L'atténuation des rayons X de 3 keV étant très importante dans l'air, il a été nécessaire de relier les différentes parties du spectromètre par des canalisations remplies d'hélium en légère surpression. Les parties *diffraction* et *détection* sont enfermées dans une enceinte thermostatisée dans le but de diminuer les effets de dilatation dus aux variations de température ambiante. Un système de climatisation permet de régler la température à l'intérieur de l'enceinte avec une précision de $0.1^\circ C$.

La vue en perspective ci-dessous servira de référence pour la description détaillée des éléments constitutifs du spectromètre.

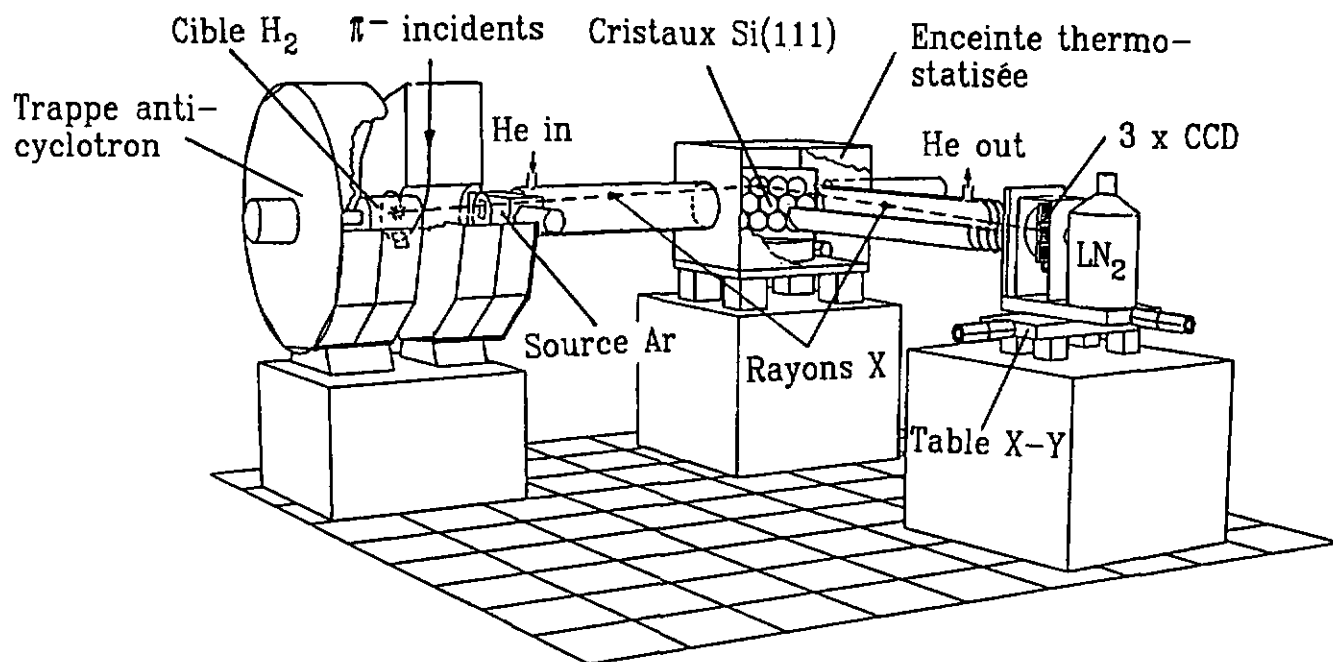


Figure 64: Les éléments du spectromètre: Trappe anticyclotron et cible H₂ à gauche, 13 cristaux Si(111) au centre et 3 détecteurs CCD à droite.

IV.2.1 Trappe à pions — Cible H_2 — Source Ar de calibration

L'hydrogène pionique est produit en ralentissant les pions du faisceau $\pi E3$ et en les stoppant dans une cible d'hydrogène gazeux. La difficulté d'une telle opération réside dans la basse densité de la cible: le pouvoir d'arrêt est faible. Une méthode possible de ralentissement des particules consiste à compenser la faible densité de la cible en plaçant sur le trajet des pions une épaisseur de matière plus dense possédant un pouvoir d'arrêt supérieur. Utilisée dans une expérience précédente [72], cette procédure provoque une importante dispersion du faisceau et seule une petite partie des pions parvient à s'arrêter dans le volume de la cible vu par le spectromètre.

Il est possible, en utilisant une trappe anticyclotron, d'augmenter la densité de pions stoppés. Cet instrument fonctionne sur le principe inverse de l'accélérateur cyclotron: un champ magnétique incurve la trajectoire des particules qui sont ralenties par une série de dégradeurs. La dispersion est très sensiblement réduite et le nombre de pions stoppés dans la cible beaucoup plus important. Nous avons pu disposer d'une telle trappe grâce à l'aimable collaboration de L. Simons [82]. La représentation schématique de cet instrument en montre les éléments essentiels: deux bobines supraconductrices refroidies à l'hélium liquide produisent un champ magnétique capable d'incurver suffisamment la trajectoire des pions de $85\text{ MeV}/c$ ($\pm 4\%$) d'impulsion du faisceau $\pi E3$. Les particules sont ralenties par un premier dégradeur en béryllium, suivi par d'autres en polyester (Mylar) d'épaisseur variable, placés sur leur chemin.

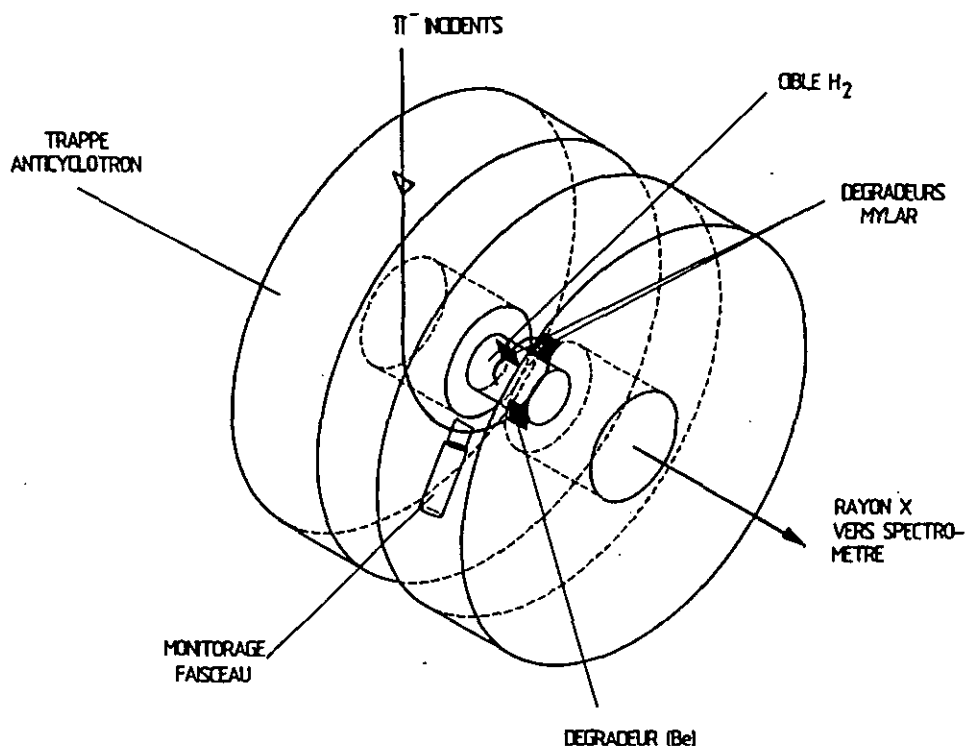


Figure 65: Représentation schématique de la trappe anticyclotron.

Le nombre de pions stoppés a été calculé par notre regretté collaborateur W. Volken [83]. Nous résumons ci-dessous ses résultats:

- Nombre de π^- dans le faisceau $\pi E3$: $3.5 \cdot 10^8 / \text{sec}/100 \mu A$
- Efficacité d'injection dans la trappe: 52 %
- Nombre de π^- injectés: $1.88 \cdot 10^6 / \text{sec}/100 \mu A$
- Efficacité d'arrêt dans la cible H_2 : 9 %
- Nombre de π^- stoppés dans la cible: $1.69 \cdot 10^5 / \text{sec}/100 \mu A$
- Densité de π^- stoppés par unité de surface de la cible visible par le spectromètre: $5.99 \cdot 10^3 / \text{sec}/100 \mu A/\text{cm}^2$
- Taux de production de la raie K_β dans $\pi^- H$: $\approx 3\%$
- Nombre de rayons X K_β par unité de surface visible: $180 / \text{sec}/100 \mu A/\text{cm}^2$

La cible d'hydrogène utilisée est un modèle dérivé de celui employé dans une précédente expérience [72]. Dans le but d'éviter des pertes d'intensité dues à l'effet Stark (mélange des niveaux $3P$ et $3S$ et absorption directe du pion par le noyau depuis le niveau $3S$), il est nécessaire de travailler avec de l'hydrogène gazeux ce qui réduit fortement la densité et par conséquent le pouvoir d'arrêt dans la cible.

Prévue initialement pour fonctionner à une pression de 3 bars et une température de $27^\circ K$ — équivalant à 40 bars aux conditions normales — nous avons pu ramener la pression effective à 1 bar — 15 bars équivalents — suite aux mesures menées en novembre-décembre 1988. Les résultats de ces mesures, présentés dans la référence [84], montrent en effet que le taux de transition est légèrement supérieur à 15 bars équivalents, bien que la densité soit plus faible. En diminuant la pression réelle d'un facteur 3 celle-ci devient égale à la pression normale, ce qui réduit les risques de rupture des fenêtres minces (Kapton $12 \mu m$) de la cible.

Devant la cible de production de $\pi^- H$ se trouve la source de calibration constituée d'un enceinte remplie d'argon. Ce gaz est soumis à l'activité (200 mCi) de sources Fe^{55} émettant à 5.9 keV. La raie $Ar(K_\alpha)$ à 2.96 keV, dont l'énergie est connue précisément, est obtenue par fluorescence et sert de référence. Les rayons X produits sont transmis à travers une fenêtre mince en Mylar. Cette source d'argon est montée sur un dispositif mécanique commandable à distance qui permet de la rendre tantôt visible et tantôt invisible pour les cristaux du spectromètre.

IV.2.2 Assemblage des cristaux et système d'orientation

Les treize cristaux de silicium collés sur leur support en verre (comme décrit dans le chapitre II) sont placés côte-à-côte dans des évidements pratiqués sur un plaque en acier. Ils sont supportés par un dispositif mécanique permettant leur orientation horizontale individuelle au moyen d'un micromoteur pas-à-pas actionnable à distance (l'orientation verticale s'effectue optiquement au moyen d'un laser et demeure ensuite fixe). Les clichés ci-dessous montrent cet assemblage vu de face. Les micromoteurs se trouvent derrière la plaque frontale et n'apparaissent donc pas.



Figure 66: *Système mécanique de support et d'orientation des cristaux. Actionnement par des micromoteurs placés derrière la plaque frontale.*



Figure 67: *Image virtuelle de notre estimé collaborateur et photographe de service P.F.A. Goudsmit, utilisant les cristaux comme miroir.*

Cet ensemble mécanique est placé sur une table tournante permettant son orientation globale. Le tout est enfermé dans une enceinte massive entourée d'éléments isolants et thermostatisée avec une précision de l'ordre de 0.05°C . Cette précaution rend négligeables les erreurs pouvant provenir d'éventuels effets de dilatation. Finalement, sur une paroi latérale de l'enceinte, un hublot transparent permet d'utiliser un laser pour aligner optiquement la source, les cristaux et les détecteurs.

IV.2.3 Système de détection

Détecteurs CCD

Nous avons décrit en détail les caractéristiques de ce type de détecteur dans le chapitre précédent. Trois CCD du modèle P8603 produits par EEV [85] ont été utilisés pour la détection des rayons X. Ils sont montés verticalement dans le plan focal du spectromètre sur un support mécanique. Ce dispositif comporte un système d'orientation biaxial permettant un positionnement précis du plan de détection. Le dessin qui suit le représente schématiquement en vue arrière.

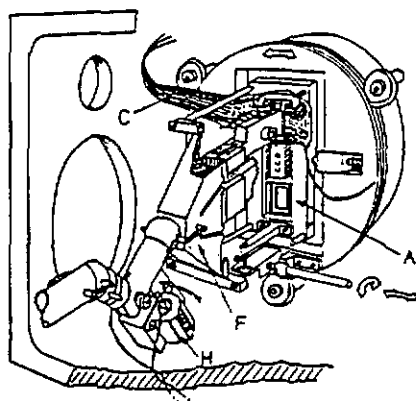


Figure 68: Vue arrière du dispositif de soutien et d'orientation des CCD. A= dispositif d'orientation, C= connecteurs électroniques souples, F= système de refroidissement (cuivre), H= résistance de chauffage.

Les CCD ayant leur surface sensible à nu, il a fallu placer l'ensemble sous vide ($2 \cdot 10^{-6} \text{ mbar}$) dans une enceinte hermétique pour éviter les effets destructeurs de la condensation. Ce compartiment est séparé de la canalisation conduisant aux cristaux par une fenêtre mince (Kapton $12 \mu\text{m}$). Le refroidissement à -100°C des détecteurs est réalisé au moyen d'une liaison massive en cuivre plongeant dans un Dewar rempli d'azote liquide (voir figures 68 et 63). La température de ce "doigt" froid est contrôlée par un système de régulation automatique, adaptant le courant traversant une résistance de chauffage pour obtenir la température souhaitée. L'ensemble est maintenu parfaitement étanche à la lumière grâce à la présence des canalisations sur le parcours des rayons X.

Le système électronique de contrôle et de commande se compose de plusieurs parties délocalisées. Le schéma de principe suivant nous servira de guide pour sa description.

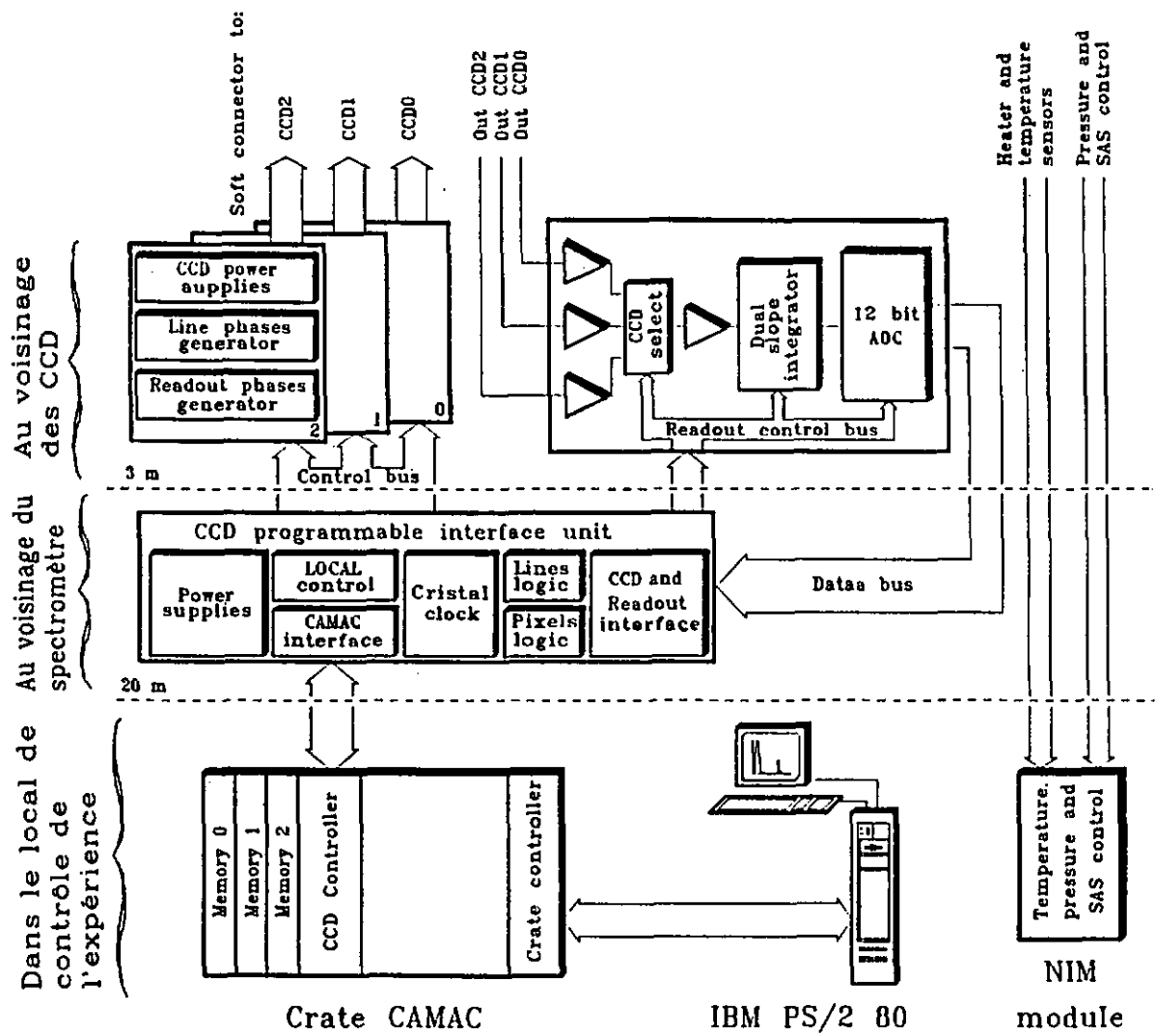


Figure 69: Schéma de principe de l'électronique de contrôle et de commande.

Nous trouvons en haut à gauche trois cartes électroniques, une pour chaque CCD, contenant les circuits de commande de la lecture (génération des phases de tension). A droite, une carte de conversion du signal analogique en signal numérique permet de saisir le contenu de chaque pixel. Chacun des trois CCD est sélectable indépendamment. Ces quatre cartes se trouvent à proximité immédiate des CCD, évitant ainsi toute perturbation pouvant altérer les signaux pendant leur transmission.

Le cliché ci-dessous montre leur emplacement, au-dessus de l'enceinte contenant les CCD et devant le Dewar d'azote liquide.

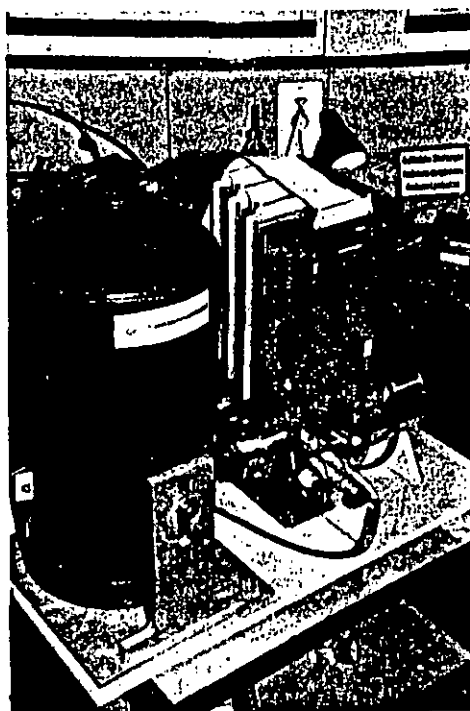


Figure 70: *Vue générale du dispositif de détection. On distingue clairement la partie électronique décrite ci-dessus.*

Cette première partie électronique est reliée à une unité d'interfaçage spécifique qui la contrôle (CCD Programmable Interface Unit).

Finalement, en dehors de l'aire d'expérimentation, nous trouvons l'ordinateur IBM PS/2 80 qui nous permet de communiquer avec l'ensemble du système à travers l'interface CAMAC associée. Un module indépendant gère le contrôle de la température et de la pression dans l'enceinte contenant les CCD. Le lecteur intéressé trouvera de plus amples détails sur ce système dans les références [86] et [80].

Table de positionnement

Pour positionner correctement sur le cercle de Rowland l'ensemble représenté par la figure 70, celui-ci a été monté sur le chariot d'une table de machine-outil. Ce dispositif autorise des déplacements bidirectionnels dans le plan horizontal (voir fig. 63 et 64) et la position selon chacun des axes est mesurée par des transducteurs linéaires possédant l'excellente résolution de $1\mu m$. La commande des axes est assurée par deux servomoteurs asservis en position.

IV.2.4 Méthode de mesure de $\pi^-H(K_\beta)$

La détermination de la longueur d'onde de la transition $3P-1S$ dans l'hydrogène pionique s'effectue en mesurant la position du pic correspondant sur les CCD. On compare ensuite cette position à celle du pic de la raie K_α de l'argon qui sert de référence et dont la longueur d'onde est connue précisément. Notre collaborateur W. Beer a calculé les relations mathématiques permettant cette détermination et a estimé les incertitudes provenant du système de positionnement [87].

Nous résumons ci-dessous la démarche suivie et donnons les formules pour les paramètres nécessaires à cette détermination. La figure suivante représente le schéma de principe de la mesure et sert à illustrer notre description.

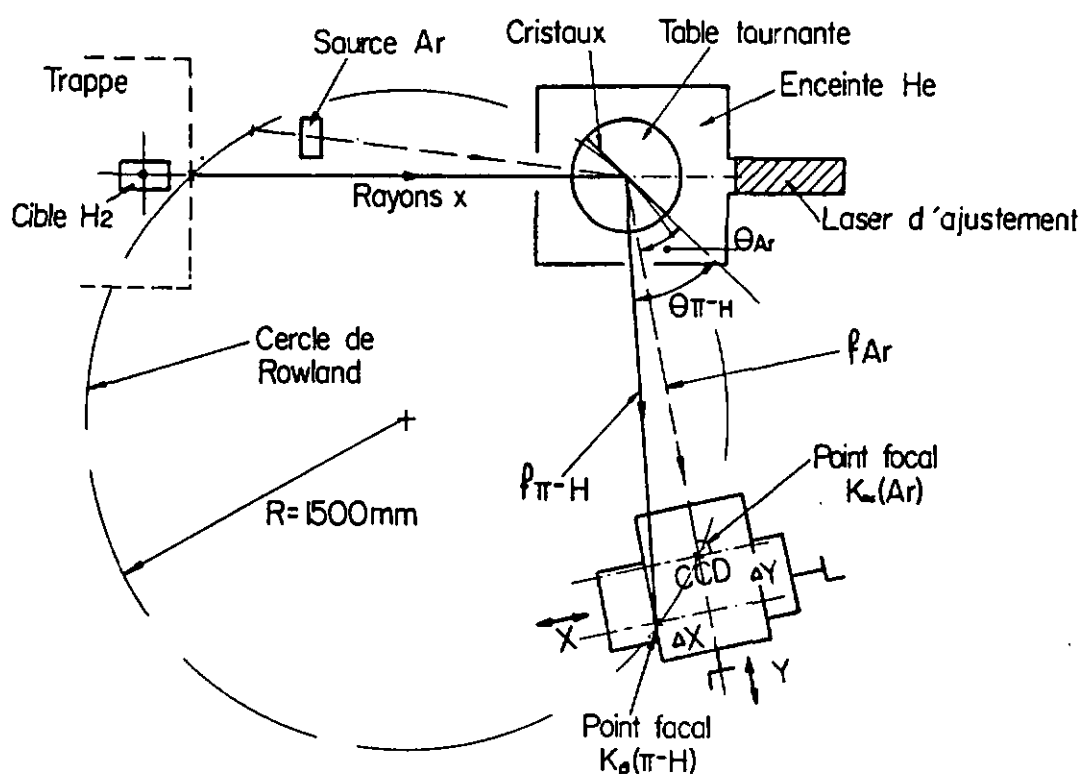


Figure 71: Schéma de principe de la mesure de la raie K_β de π^-H à partir de la mesure de la raie K_α de l'argon.

Le cercle de Rowland possède un rayon de 1500 mm et nous remarquons que ni la source H_2 , ni celle de calibration (Ar) ne se trouvent sur ce cercle. Cette disposition, choisie pour des raisons de commodité, ne porte pas préjudice à la mesure car l'extension de ces sources est largement suffisante pour couvrir complètement l'acceptance du spectromètre.

La détermination de la longueur d'onde de la raie K_β de π^-H s'effectue en plusieurs étapes successives qui sont:

1°. Les différents éléments (source-cristaux-détecteurs) sont d'abord alignés à l'aide du laser d'ajustement placé à droite sur la figure précédente.

2°. La raie de calibration $Ar(K_\alpha)$ est ensuite mesurée et les positions X et Y de la table sont ajustées de telle sorte que le pic correspondant à cette raie se trouve au milieu des CCD.

3°. On déplace alors le chariot pour amener les CCD sur la position supposée correspondre à l'angle de Bragg pour $\pi^-H(K_\beta)$. La différence de position théorique est donnée par

$$\begin{aligned}\Delta X_{th} &= f_{Ar} \cdot \frac{\lambda_{\pi^-H}^{th}}{\lambda_{Ar}} \cdot \sin(\theta_{\pi^-H}^{th} - \theta_{Ar}) \\ \Delta Y_{th} &= f_{Ar} \cdot \left[\frac{\lambda_{\pi^-H}^{th}}{\lambda_{Ar}} \cdot \cos(\theta_{\pi^-H}^{th} - \theta_{Ar}) - 1 \right]\end{aligned}\quad (81)$$

où: ΔX_{th} et ΔY_{th} sont les différences de position sur les axes X et Y calculées théoriquement;

f_{Ar} est la distance focale pour la raie $Ar(K_\alpha)$ de calibration;

$\lambda_{\pi^-H}^{th}$ et λ_{Ar} sont les longueurs d'onde, calculée théoriquement pour la transition K_β de π^-H , et tabulée pour $Ar(K_\alpha)$;

$\theta_{\pi^-H}^{th}$ et θ_{Ar} sont les angles de Bragg correspondants.

Les différences de position ΔX_{th} et ΔY_{th} peuvent être assignées avec une précision de $\pm 10 \mu m$.

4°. On mesure ensuite la transition $3P-1S$ dans π^-H dont on détermine la position dX_{CCD} par rapport au centre des CCD. La différence de position totale X par rapport à la raie de référence est alors donnée par

$$X = \Delta X_{th} + dX_{CCD} \quad (82)$$

avec ΔX_{th} calculé selon (81).

L'incertitude sur dX_{CCD} est estimée à $\pm 20 \mu m$ (taille d'un pixel) ce qui donne un incertitude totale sur X de $\pm 30 \mu m$.

5°. La différence de position Y est mesurée par déplacements systématiques sur l'axe correspondant jusqu'à obtenir le réflexe le plus étroit possible. Cette position correspond au point focal et la distance focale correspondante est donnée par

$$f = f_{Ar} + Y. \quad (83)$$

L'incertitude sur f vaut $\pm 0.5 mm$.

6°. Le calcul de la longueur d'onde $\lambda_{\pi-H}$ effectivement mesurée se base sur la relation

$$\sin(\theta_{\pi-H}^{th} - \theta_{Ar}) = \frac{X}{\sqrt{X^2 + f^2}}. \quad (84)$$

En développant (84) et en utilisant la loi de Bragg on obtient finalement

$$\lambda_{\pi-H} = A \cdot \sqrt{(2d)^2 - \lambda_{Ar}^2} + \lambda_{Ar} \cdot \sqrt{1 - A^2} \quad (85)$$

avec: $A = \frac{X}{\sqrt{X^2 + f^2}}$;

d = distance interréticulaire pour $Si(111)$;

λ_{Ar} = longueur d'onde de la raie K_{α} de l'argon.

7°. Un calcul d'erreur [87] permet finalement de déterminer l'erreur systématique sur $\lambda_{\pi-H}$ provenant du système de mesure:

$$\left(\frac{\Delta \lambda_{\pi-H}}{\lambda_{\pi-H}} \right)_{sys} \approx 25 \text{ ppm}. \quad (86)$$

Convertie en énergie, cette valeur correspond à

$$\Delta E_{sys} = \pm 0.08 \text{ eV}, \quad (87)$$

contribuant de manière négligeable à l'incertitude totale.

IV.3 Acquisition des données — Analyses et résultats

Nous décrivons ici chronologiquement la succession des diverses étapes de l'acquisition des données.

Une première calibration (source Ar) a été établie en mesurant la réponse de l'ensemble des cristaux, alignés optiquement par laser au préalable. L'ajustement de l'orientation des cristaux les uns par rapport aux autres a ensuite été réalisé par la mesure de la réponse individuelle de chaque cristal. Ceci s'est avéré nécessaire car l'alignement optique fait appel à la réflexion de la lumière sur la surface des cristaux, qui ne coïncide pas forcément avec un plan cristallin (111); un écart d'orientation de $\pm 1.2'$ d'arc est même possible selon les indications du fabricant.

Cet alignement effectué, nous avons ensuite mesuré la raie $\pi^-H(K_\beta)$. Les problèmes de saturation des CCD soumis à une trop longue exposition nous ont conduit à scinder cette mesure en une succession de mesures partielles d'une durée variant de 2 h à 2.5 h. Le résultat final est obtenu par sommation des résultats partiels.

Du fait de la durée importante de l'expérience (plusieurs semaines), il a été nécessaire de vérifier régulièrement la stabilité mécanique et électronique du système. Ce contrôle s'opérait en intercalant une calibration de 20 min entre chaque mesure π^-H . Nous nous sommes assurés de la régularité du bruit de fond en remplaçant l'hydrogène de la cible par du deutérium et en mesurant la réponse du système dans la position correspondant à $\pi^-H(K_\beta)$.

Finalement, une mesure directe (sans spectromètre) des rayons X émis par la cible d'hydrogène a été réalisée en plaçant les CCD directement en face de celle-ci. Nous avons pu ainsi vérifier que le taux de comptage obtenu avec le spectromètre correspondait bien au taux de rayons X émis par la source.

IV.3.1 Alignement et calibration

L'alignement de l'ensemble mécanique de positionnement s'effectue au moyen du laser schématisé sur la droite de la figure 71. On détermine d'abord une direction de référence passant par l'axe de rotation de la table goniométrique et la source d'hydrogène. Un miroir ajusté précisément sur l'axe de rotation précédent permet, en tournant la table, de visualiser la direction de diffraction des rayons X et fixer ainsi la position des détecteurs CCD. L'ensemble mécanique supportant les cristaux est alors monté sur la table tournante. L'orientation de chaque cristal est ajustée par focalisation sur le plan de détection de l'image d'un point lumineux placé à l'intersection du cercle de Rowland et de l'axe de référence. Le système est alors prêt pour un ajustement plus précis avec les rayons X de la source d'argon.

Une première calibration avec l'ensemble des cristaux a fait apparaître sur les CCD un pic très large, mettant en évidence la différence existant entre l'axe optique de la surface et l'axe [111] des plans cristallins. Il a donc été nécessaire de corriger la position de chaque cristal individuellement en mesurant successivement la réponse de chacun d'eux. La première série de mesures a montré que les centroïdes des réflexes

étaient dispersées sur environ 20 mm ($\pm 17'$ d'arc) au niveau des détecteurs. Les ajustements successifs des orientations ont permis de réduire cet intervalle à environ 0.7 mm ($\pm 0.6'$ d'arc ou $\pm 0.6\text{ eV}$).

IV.3.2 Réponse instrumentale

L'image reproduite ci-dessous est issue d'une mesure de calibration typique avec l'ensemble des cristaux, après correction de leur orientation. C'est une représentation de ce que "voit" un CCD après diffraction de Bragg.

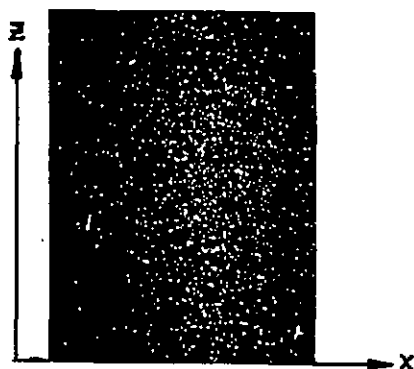


Figure 72: Image obtenue sur un CCD avec la source de calibration $\text{Ar}(K_\alpha)$.

Après analyse du contenu des pixels et projection de l'image sur l'axe x , on obtient la réponse globale du spectromètre sous la forme d'un spectre en position qui a l'allure suivante:

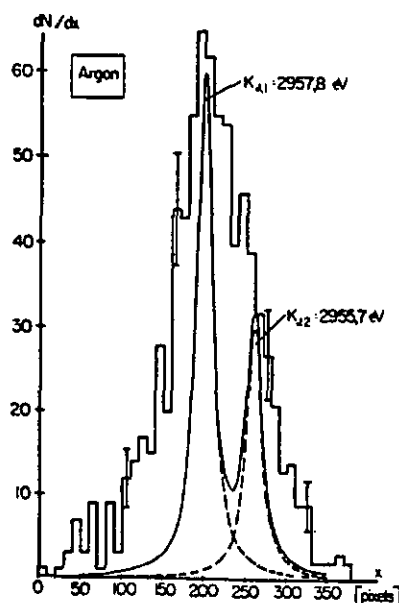


Figure 73: Spectre en position typique d'une calibration avec $\text{Ar}(K_\alpha)$. L'abscisse est orientée selon les angles de Bragg croissants (l'énergie diminue).

Sur cette figure nous avons également dessiné deux courbes de forme lorentzienne représentant l'élargissement naturel des raies $K_{\alpha 1}$ et $K_{\alpha 2}$ de l'argon. Cet élargissement vaut 0.8 eV FWHM . La comparaison de la largeur "naturelle" avec celle de l'histogramme mesuré permet de déduire la résolution angulaire de notre spectromètre. Cette résolution est d'environ $3' \text{ d'arc}$ (3 eV FWHM) pour une énergie de 2.96 keV ($\frac{\Delta E}{E} \approx 1\%$). Nous remarquons aussi sur la figure 73 une asymétrie de la courbe mesurée sur sa partie gauche. Celle-ci provient du fait que les réflexes des différents cristaux ne sont pas parfaitement superposés.

D'autre part, nous avons pu constater que la forme des réflexes variait d'un cristal à l'autre, certains présentant une résolution moins bonne et d'autres meilleure. Nous pensons que ces différences sont dues principalement aux supports en verre sur lesquels sont collés les cristaux. Certains de ceux-ci ont montré en effet des irrégularités parfois importantes dans la courbure de leur surface.

En plus du spectre en position, les CCD fournissent aussi une réponse en énergie grâce à laquelle il est possible de fixer les seuils permettant la reconnaissance des événements (voir § III.3) et reconstruire ainsi le spectre en position vu ci-dessus. La figure suivante montre un spectre en énergie typique.

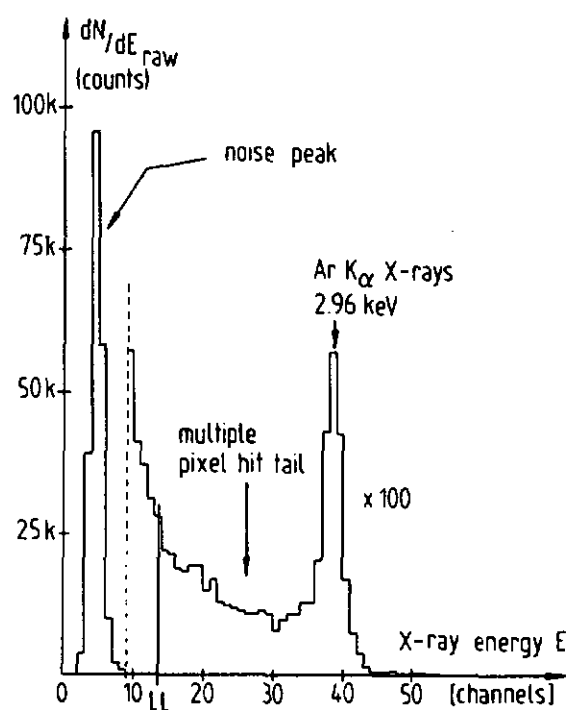


Figure 74: Spectre en énergie $\text{Ar}(K_{\alpha})$. La "queue" à gauche du pic est due aux événements dispersés sur plusieurs pixels (voir § III.3).

Nous avons mesuré une résolution en énergie des CCD de 172 eV FWHM pour la raie $\text{Ar}(K_{\alpha})$ de 2.96 keV ($\frac{\Delta E}{E} = 5.8\%$). Cette résolution apparaît excellente pour ce type de détecteurs.

IV.3.3 Stabilité mécanique et électronique

La stabilité du système de mesure a été contrôlée au moyen des spectres de calibration enregistrés à intervalles réguliers. Les spectres en position ont permis de vérifier la stabilité mécanique: en reportant graphiquement la position de la centroïde du pic en fonction du temps, nous avons obtenu une courbe permettant de déceler les déplacements résultants d'éventuelles instabilités mécaniques.

La stabilité électronique a été contrôlée à l'aide des spectres en énergie des CCD: la position du pic mesuré est déterminée par le gain électronique, susceptible de varier sous l'influence de divers facteurs comme la température, l'humidité, les perturbations électriques, etc... Le relevé graphique de la position du pic en énergie permet de déceler les variations du gain, ce qui fournit une mesure de la stabilité électronique. Les graphes suivants montrent les variations de la position des pics de position et d'énergie tels que nous les avons mesurées au cours de notre expérience.

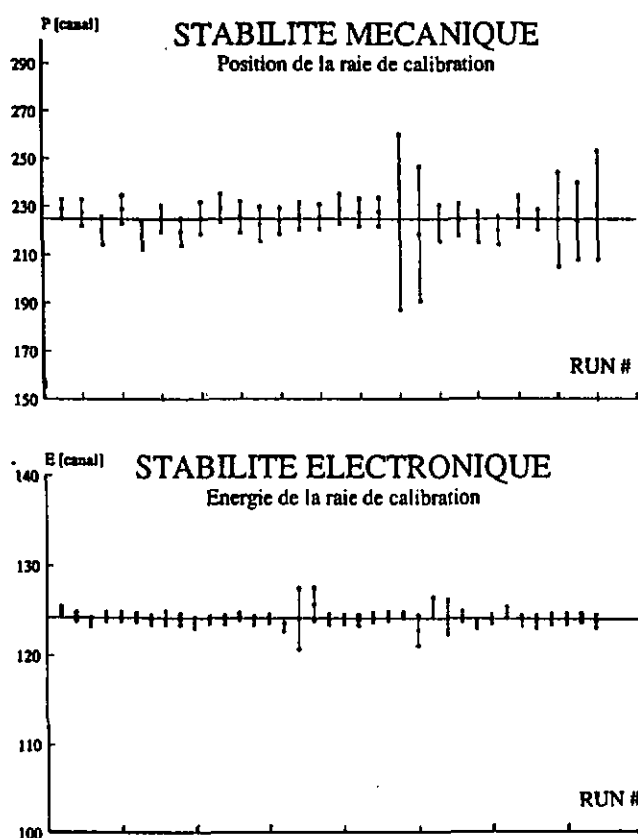


Figure 75: Contrôle des stabilités mécanique et électronique du spectromètre.

Compte tenu des incertitudes statistiques, nous constatons une excellente stabilité du système, résultant sans doute des précautions prises en régulant précisément la température.

IV.3.4 Détermination de la longueur d'onde de $\pi^-H(K_\beta)$

La mesure de la transition $3P-1S$ de l'atome π^-H a été fractionnée en 133 "runs" d'une durée d'environ 2h. Chaque "run" a été analysé indépendamment à partir des seuils en énergie fournis par les spectres de calibration. Étant donné le faible taux d'événements détectés — 1 événement / 6.5 h / 100 μA de faisceau — nous n'avons retenu que ceux occupant 1 seul pixel CCD. Les événements dispersés sur plusieurs pixels, représentant une minorité ($\approx 30\%$), étaient difficilement identifiables du fait de la présence d'un important bruit de fond. L'image ci-dessous reproduit ce que "voyait" un CCD au cours d'une mesure π^-H typique.

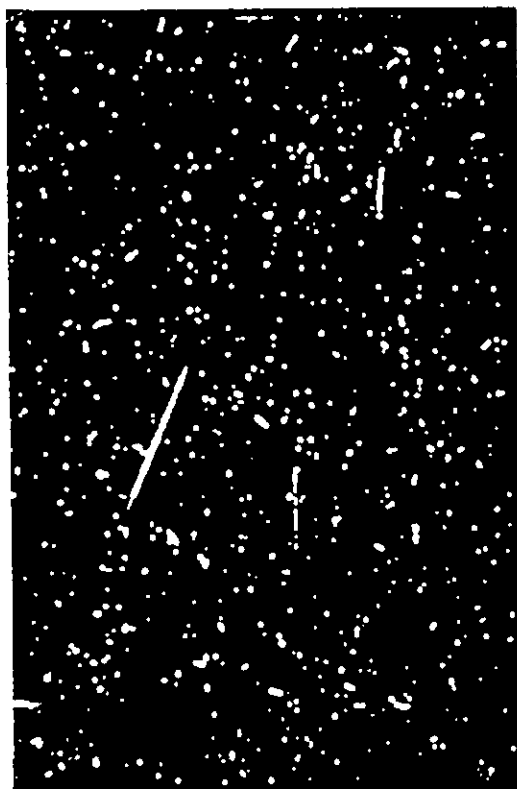


Figure 76: Image obtenue avec un CCD mesurant la transition $3P-1S$ de la source π^-H . La trace continue révèle le passage d'une particule chargée.

Il est impossible de reconnaître sur la figure 76 les événements qui nous intéressent sans une analyse software. Par contre, on voit très bien l'effet d'une particule chargée trahissant son passage dans le substrat du CCD par la large trace continue qu'elle produit en perdant son énergie.

Le résultat final a été obtenu en sommant les 133 analyses partielles. Le spectre en position résultant, projeté sur l'axe x est représenté dans la figure suivante.

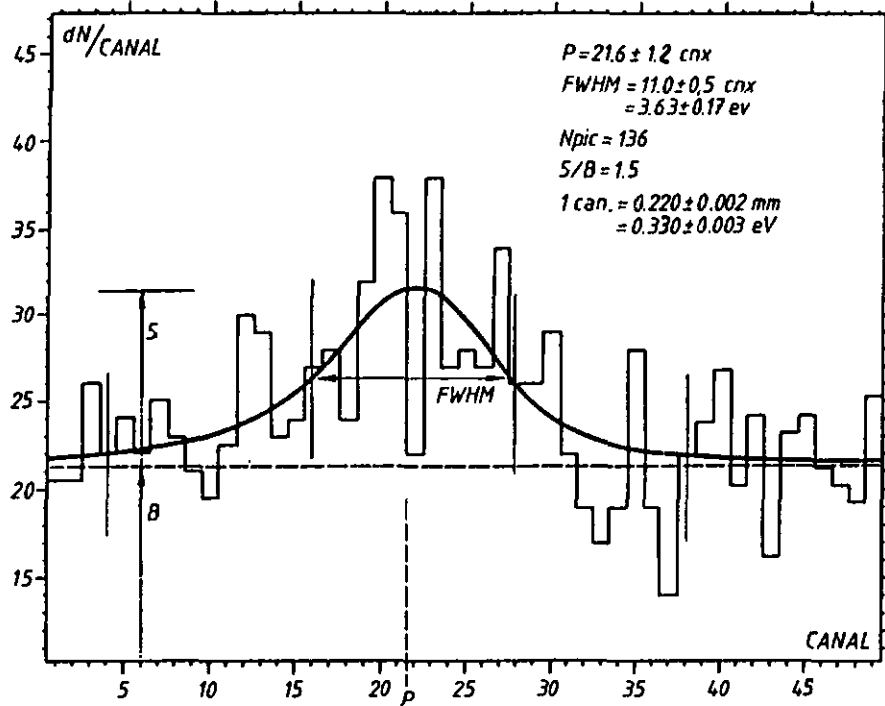


Figure 77: Spectre en position résultant de la somme des mesures partielles de la transition $3P-1S$ dans π^-H .

La courbe ajustée sur l'histogramme mesuré est une gaussienne modifiée en lui ajoutant des "queues" à décroissance exponentielle et en la superposant à un bruit de fond constant. La largeur à mi-hauteur ($FWHM$) de la gaussienne, ainsi que les queues exponentielles ont été fixées par un ajustement du même type sur les spectres de calibration. En effet, étant donné la proximité des raies $Ar(K_\alpha)$ et $\pi^-H(K_\beta)$, on s'attend à ce que la réponse instrumentale ne varie pas de manière significative. Les paramètres pertinents obtenus au moyen de cet ajustement sont les suivants:

- Position du pic: 21.6 ± 1.2 canaux
- Largeur $FWHM$: 11.0 ± 0.5 canaux
- Nombre de coups dans le pic: 136
- Rapport signal/bruit: 1.5

Les résultats déduits de ces paramètres sont donnés dans le § IV.3.6.

IV.3.5 Bruit de fond

Au vu du résultat obtenu (figure 77), la question s'est posée de savoir si le bruit de fond était réellement constant sur l'étendue du spectre. Dans le but de clarifier ce point, nous avons remplacé l'hydrogène de la cible par du deutérium et, sans déplacer les détecteurs, nous avons mesuré le bruit de fond provenant de la source π^-D . Comme il n'existe pas de transition d'énergie comparable à $\pi^-H(K_\beta)$ dans π^-D , cette mesure donne uniquement la contribution du bruit de fond.

L'analyse a montré que ce bruit était effectivement constant sur la plage de mesure des CCD et son intensité était la même que celle obtenue avec π^-H .

A propos de bruit de fond, relevons ici un effet imprévu des détecteurs CCD qui nous a posé de sérieux problèmes d'interprétation lors des premières heures de mesure, jusqu'à ce que nous en découvrions l'explication.

Les premiers résultats partiels faisaient apparaître — un peu rapidement il est vrai — deux zones d'intensité supérieure à la moyenne sur les spectres en position. Ces zones n'étaient séparées que d'environ 3 eV et pouvaient laisser croire à l'apparition de deux pics dont l'interprétation nous échappait. Une analyse plus fine a montré que ces "pics" ne résultaient pas de la détection de rayons X, mais de la contribution systématique de quelques pixels isolés dont le contenu en énergie correspondait par hasard à celui attendu pour les rayons X. Ces pixels, toujours les mêmes, se différenciaient des autres par leur taux de bruit thermique supérieur, bien que demeurant assez faible. Cette caractéristique n'était pas apparue lors des tests et des calibrations dont la courte durée (≈ 30 min) ne suffisait pas à amener ce bruit à un niveau comparable à l'énergie des rayons X. En outre, la statistique importante rendait ce phénomène invisible. Le problème a été résolu en identifiant les pixels incriminés et en supprimant leur contribution lors de l'analyse.

IV.3.6 Détermination du déplacement d'interaction forte ϵ_{1S}

Ainsi que nous l'avons vu au chapitre I, le déplacement d'interaction forte ϵ du niveau $1S$ de π^-H se déduit de la comparaison de l'énergie mesurée de la transition $3P-1S$ avec la valeur calculée à l'aide de l'équation de Klein-Gordon. Il s'agit donc de déterminer l'énergie de $\pi^-H(K_\beta)$ à partir de nos mesures.

Rappelons brièvement le principe de cette détermination qui est décrit au § IV.2.4. Après avoir mesuré la position sur les CCD du pic de calibration $Ar(K_\alpha)$, les détecteurs sont déplacés des quantités connues ΔX et ΔY pour mesurer la position de la raie $\pi^-H(K_\beta)$. On en déduit alors la différence de position relative des deux pics et, connaissant avec précision l'énergie — donc l'angle de Bragg — de $Ar(K_\alpha)$, on détermine l'énergie de $\pi^-H(K_\beta)$ à l'aide des relations indiquées au § IV.2.4. Les données sont les suivantes:

- Position CCD de $Ar(K_\alpha)$: 21.2 ± 0.14 canaux.
- Position CCD de $\pi^-H(K_\beta)$: 12.6 ± 1.2 canaux.
- Différence de position CCD: $\Delta X_{CCD} = 8.6 \pm 1.2$ canaux.
- Conversion "canal" $\leftrightarrow$ "mm": $1 \text{ canal} = 0.220 \pm 0.002 \text{ mm}$.
- Déplacement ΔX ($Ar \rightarrow \pi^-H$): $\Delta X = 47.92 \pm 0.01 \text{ mm}$.
- Déplacement ΔY ($Ar \rightarrow \pi^-H$): $\Delta Y = 50.77 \pm 0.01 \text{ mm}$.
- Différence de position ($Ar \rightarrow \pi^-H$): $X = 46.03 \pm 0.27 \text{ mm}$.
- Distance focale $Ar(K_\alpha)$: $f_A = 2000.0 \pm 0.5 \text{ mm}$.
- Distance focale $\pi^-H(K_\beta)$: $f = f_A + \Delta Y = 2050.77 \pm 0.5 \text{ mm}$.

La longueur d'onde de $\pi^-H(K_\beta)$ est donnée par l'équation (85) que nous rappelons ici:

$$\lambda_{\pi^-H} = A \cdot \sqrt{(2d)^2 - \lambda_{Ar}^2} + \lambda_{Ar} \cdot \sqrt{1 - A^2},$$

avec

$$A = \frac{X}{\sqrt{X^2 + f^2}} = (22.4 \pm 0.14) \cdot 10^{-3}.$$

La distance interréticulaire vaut $d = 3.1353 \text{ \AA} \pm 100 \text{ ppm}$.

La longueur d'onde λ_{Ar} s'obtient par la relation (cf. réf. [88])

$$\lambda = \frac{2 \cdot 6.1992121}{E}$$

avec λ en [$\text{\AA}$] et E en [keV].

Les tables [89] donnent

$$E[Ar(K_{\alpha 1})] = 2957.790 \text{ eV} \pm 3 \text{ ppm}$$

d'où on déduit

$$\lambda_{Ar} = 4.191786 \text{ \AA} \pm 3 \text{ ppm}.$$

On obtient ainsi finalement $\lambda_{\pi-H} = 4.2954 \pm 0.0007 \text{ \AA}$, que l'on convertit en énergie au moyen de la relation précédente:

$$E_{\pi-H}^{kp} = 2886.5 \pm 0.5 \text{ eV}.$$

Lors d'une ultime vérification de l'alignement en fin d'expérience, il a été constaté que la source de calibration ne se trouvait pas placée correctement, produisant ainsi une erreur systématique de 0.3 eV , à soustraire de la valeur précédente pour obtenir la valeur finale:

$$\boxed{E_{\pi-H}^{kp} = 2886.2 \pm 0.5 \text{ eV.}} \quad (88)$$

La valeur calculée au moyen de l'équation de Klein-Gordon, y compris les corrections, était de (cf. Table 1, § 1.4.4):

$$E_{\pi-H}^{th(k_0)} = 2878.8 \text{ eV.} \quad (89)$$

La différence de ces deux dernières valeurs donne le déplacement d'interaction forte cherché:

$$\boxed{\epsilon_{1S} = E_{\pi-H}^{th(k_0)} - E_{\pi-H}^{kp} = -7.4 \pm 0.5 \text{ eV.}} \quad (90)$$

Egalement vue dans le chapitre I (§ 1.3.4), la relation de Deser (26) et (27) permet de relier le déplacement ϵ_{1S} aux longueurs de diffusion pion-nucléon a_1 et a_3 . Au moyen de la relation (29) et de la valeur du déplacement donné par (90) nous pouvons déduire la combinaison $2a_1 + a_3$:

$$\boxed{2a_1 + a_3 = 0.381 \pm 0.026 \text{ fm} = 0.270 \pm 0.018 \text{ m}_{\pi}^{-1},} \quad (91)$$

avec la correspondance $1 \text{ m}_{\pi}^{-1} = 1.414 \text{ fm}$.

Ces résultats seront discutés dans le chapitre V.

IV.3.7 Mesure directe des rayons X émis par la source π^-H

Cette mesure, effectuée dans la phase conclusive de notre expérience, avait deux buts. Le premier était de pouvoir déterminer de manière indépendante le taux d'événements émis par la cible d'hydrogène. Ce nombre est très important car il fournit la "normalisation" pour le calcul de l'efficacité des diverses parties du spectromètre. Cette détermination avait été faite une première fois en début d'expérience par L. Simons et collaborateurs à l'aide d'un détecteur Si(Li). Notre mesure finale donne un résultat très proche de celui de L. Simons, comme le montre la comparaison faite par W. Volken dans la référence [83].

La seconde motivation consistait à prouver la possibilité d'utiliser les CCD en présence d'un bruit de fond très important. En limitant la durée d'exposition des CCD, et grâce à leur grande capacité de réjection du bruit de fond, cette mesure a confirmé cette possibilité d'utilisation qui présente en plus l'avantage de fournir une image bidimensionnelle des événements détectés. Afin d'illustrer nos propos, nous reproduisons ci-dessous les spectres en énergie obtenus lors de ces mesures "directes" avec les deux systèmes de détection. Dans la mesure avec les CCD, ceux-ci ont été placés en vision directe de la cible π^-H , vis-à-vis de la trappe (voir fig. 63).

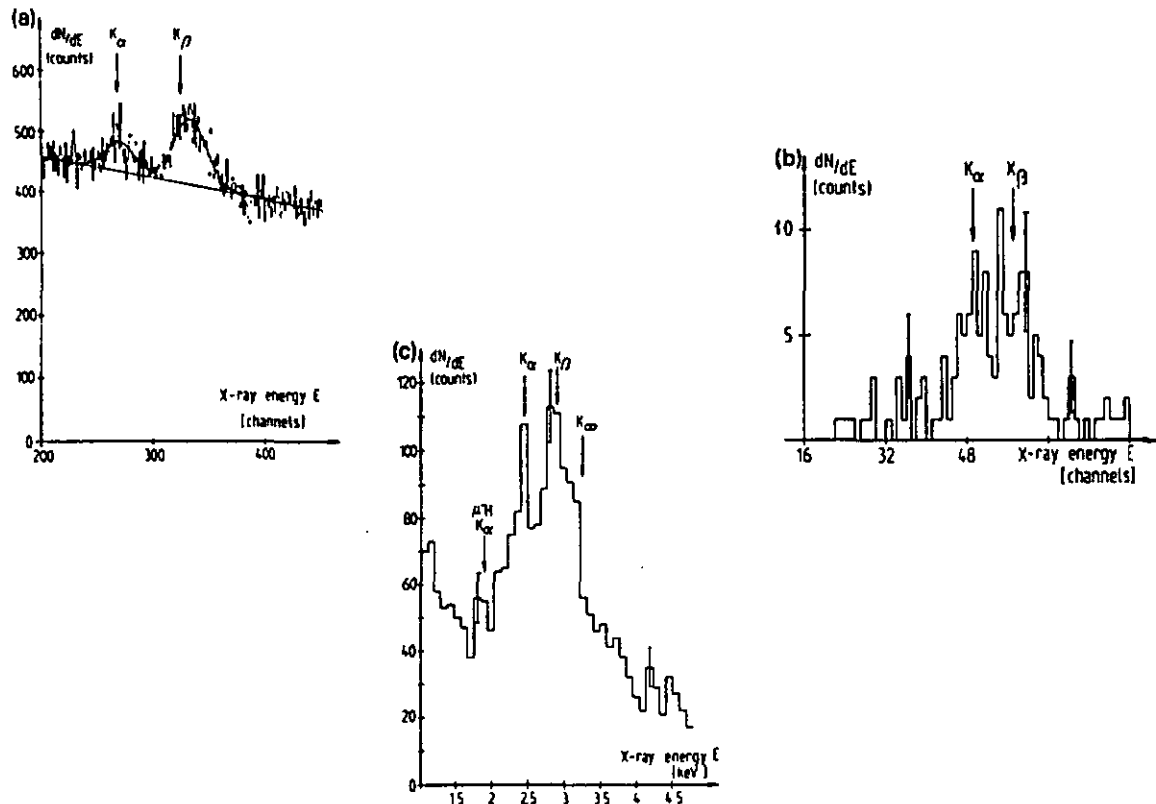


Figure 78: Spectres en énergie obtenus par mesures "directes" des rayons X émis par la cible π^-H . Les trois spectres sont commentés dans le texte.

La figure 78 (a) résulte d'une mesure avec un détecteur Si(Li) en coïncidence avec les signaux fournis par la détection des π^- entrant. Le taux de rayons X des transitions K est d'environ 308 h^{-1} . Le rapport signal/bruit est de 0.25.

Le spectre 78 (b) a été obtenu dans les mêmes conditions que 78 (a), mais une coïncidence supplémentaire était requise: celle des deux γ résultant de la désintégration du π_0 provenant de l'absorption du π^- par le noyau H . On constate que le rapport signal/bruit est excellent, mais le taux d'événements n'est alors plus que d'environ 7 h^{-1} .

La figure 78 (c) montre les résultats obtenus en fin d'expérience avec nos CCD. Le rapport signal/bruit est d'environ 2 et le taux de rayons X des transitions K est d'environ 192 h^{-1} . Remarquons qu'il n'y a pas de coïncidence avec les CCD, seules les capacités de discrimination du bruit de fond sont utilisées, d'où simplification du dispositif de détection. D'autre part, aucun blindage n'a été utilisé pour diminuer le bruit de fond et il aurait été possible d'approcher d'avantage les CCD de la cible afin d'augmenter le taux d'événements en accroissant l'angle solide de détection.

Ainsi concluons-nous l'exposé brut de l'ensemble des résultats fournis par cette expérience. Les objectifs que nous nous étions fixés ont pu être atteints en grande partie et, bien que non prévus dans le programme de mesure, des résultats supplémentaires très intéressants (mesures directes) ont été obtenus. Une discussion détaillée sera entreprise dans le chapitre suivant et quelques suggestions d'amélioration seront proposées.

V Synthèse et suggestions

V.1 Résumé

V.2 Longueurs de diffusion πN : nouvelle situation

V.3 Le spectromètre: possibilités actuelles et améliorations envisageables

V.4 Conclusion

V.1 Résumé

Ce dernier chapitre passe en revue les principaux résultats obtenus. Nous décrivons d'abord la nouvelle situation dans la connaissance des longueurs de diffusion πN à l'issue de notre mesure, et les implications qui en découlent sur le plan théorique. Nous discutons ensuite les raisons possibles du désaccord manifeste apparu entre notre mesure actuelle et celle effectuée en 1985, et proposons une étude systématique de cette différence. La dernière partie de cette synthèse est consacrée à la réponse instrumentale du spectromètre et aux améliorations dont il pourrait faire l'objet. Nous concluons notre travail par un regard optimiste tourné vers le futur.

V.2 Longueur de diffusion πN : nouvelle situation

V.2.1 Notre mesure parmi les autres

Dans le chapitre I, nous avons exposé l'état des connaissances avant notre mesure en ce qui concerne les longueurs de diffusion d'onde S a_1 et a_3 de πN ou, plus précisément, les combinaisons $(2a_1 + a_3)$ et $(a_1 - a_3)$ de celles-ci. Nous reprenons ici le graphique de la figure 1 qui illustre notre propos en lui ajoutant le résultat de notre mesure, résultat donné par la relation (91).

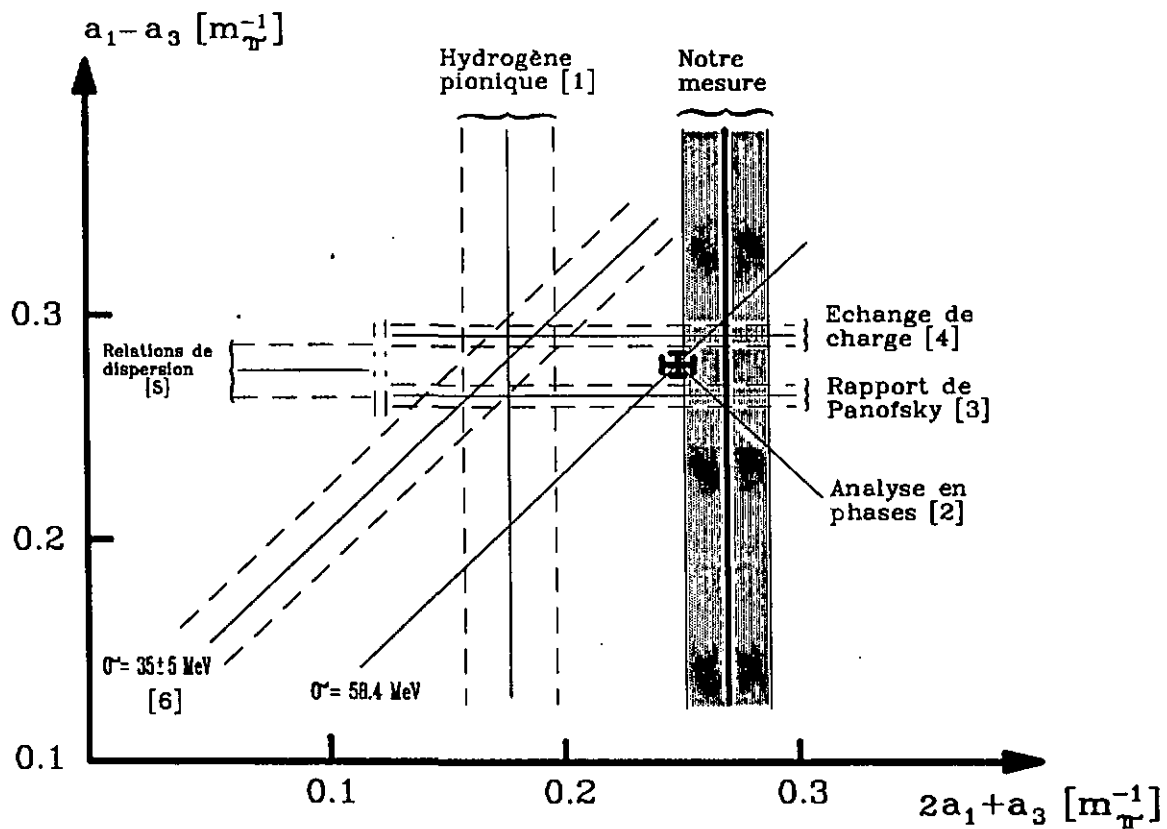


Figure 79: Nouvelle situation dans la connaissance des longueurs de diffusion pion-nucléon.

La résolution de notre spectromètre ne nous a pas permis de déterminer la largeur de la transition $\pi^- H(K_\beta)$, largeur qui aurait fixé la valeur de la combinaison $(a_1 - a_3)$ (cf. équation (26)). Nous avons donc représenté une bande dont le centre correspond à la valeur de la combinaison $(2a_1 + a_3)$ telle que nous l'avons mesurée, et la largeur en gris symbolise l'incertitude sur cette valeur. Comme dans le chapitre I, les chiffres entre [] renvoient aux références correspondantes.

Nous constatons que notre détermination de $(2a_1 + a_3)$ est en bon accord avec l'analyse en phases du groupe de Karlsruhe (cf. réfs [3] et [6]), alors qu'elle diffère considérablement de la précédente mesure sur l'hydrogène pionique (cf. réf. [2]). Il semble donc se confirmer qu'un terme σ de 35 MeV tel qu'il est calculé théoriquement (voir chapitre I) soit sous-estimé et que sa valeur s'approche plutôt de 60 MeV. Une détermination plus récente de la combinaison $(2a_1 + a_3)$, avec le même instrument que nous avons utilisé (voir réf. [90]), vient conforter nos conclusions: la valeur rapportée est $2a_1 + a_3 = 0.258 \pm 0.012 m_\pi^{-1}$, compatible avec la nôtre ($2a_1 + a_3 = 0.270 \pm 0.018 m_\pi^{-1}$).

V.2.2 Implications sur le modèle théorique

Ainsi que nous l'avons écrit dans le § I.3.3, la théorie chirale perturbative permet d'estimer la valeur du terme σ à environ 35 MeV en se basant sur le spectre des masses baryoniques et en supposant que le proton ne contient pas de quark étrange. Un terme σ de 60 MeV, que les résultats expérimentaux semblent confirmer, impliquerait une forte proportion de quark étrange dans la constitution du proton. Or, ceci s'expliquerait difficilement dans le cadre de QCD (voir réfs [12] et [13]). Il semblerait donc qu'il faille chercher dans une autre direction, soit une explication des différences, soit une meilleure interprétation.

La détermination théorique de la valeur de σ fait intervenir un calcul de perturbations (cf. § I.3.3) jusqu'à un ordre nécessairement limité. Il se pourrait donc que les contributions des termes d'ordres supérieurs ne soient pas négligeables et que la valeur théorique de σ en soit modifiée notablement.

Ce problème est délicat et dépasse nos compétences. Nous laissons le soin à nos amis théoriciens d'apporter les éclaircissements nécessaires à lever la discordance entre valeurs expérimentale et théorique du terme σ .

Du point de vue expérimental, seule une mesure simultanée du déplacement ε_{1S} et de l'élargissement Γ_{1S} de π^-H permettrait de fixer sans ambiguïté la valeur de σ . La détermination des deux combinaisons $(2a_1 + a_3)$ et $(a_1 - a_3)$ des longueurs de diffusion πN apporterait une réponse définitive à cette question.

V.2.3 $\pi^-H(1985)$ et $\pi^-H(1990)$: quelles différences?

Si nous comparons le résultat de la présente mesure avec celui obtenu en 1985 (voir réf. [2]), nous constatons un écart important (bien supérieur aux incertitudes) entre les deux valeurs:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1S}(1985) &= -4.9 \pm 0.7 \text{ eV} \\ \varepsilon_{1S}(1990) &= -7.4 \pm 0.5 \text{ eV} .\end{aligned}\tag{92}$$

Il ne nous a pas été possible de justifier un tel désaccord, il convient donc d'analyser en détail les éléments qui distinguent les deux expériences.

En 1985 nous avons utilisé un spectromètre à cristal de graphite (cf. réfs [2] et [71]) de 25 eV de résolution en énergie à 2.5 keV. La raie mesurée était issue de la transition $2P-1S$ de π^-H , produite dans une cible H_2 refroidie à 27 K et pressurisée à 3 bars (40 bars équivalents aux conditions normales). La calibration était effectuée avec la raie K_α du vanadium, mesurée au 2^e ordre de diffraction.

Notre spectromètre à cristaux de silicium possède une résolution en énergie de 3 eV environ à 3 keV. La transition mesurée est la $3P-1S$ de π^-H et la cible H_2 est refroidie et pressurisée à 1 bar (15 bars équivalents). La ligne de calibration est la raie K_α de l'argon, mesurée au 1^{er} ordre.

Nous ne pensons pas que le fait d'utiliser une raie de calibration au 2^e ordre plutôt qu'au 1^{er} puisse engendrer une telle différence dans la mesure de ϵ_{1S} . Par contre, il n'est pas exclu que le résultat soit influencé de manière importante par la pression de la cible H_2 , conjointement au fait que le niveau initial des transitions est différent ($2P$ en 85 et $3P$ en 90). En effet, nous avons vu dans le chapitre I (§ I.4.5) que l'effet Stark dépend de la pression et que des effets moléculaires mal connus peuvent apparaître lorsque la densité de la cible est proche de la densité correspondant à la phase liquide. Ceci pourrait expliquer la différence constatée, dès lors que les conditions de pression des deux mesures étaient différentes.

Ce problème mériterait une étude systématique, tant du point de vue théorique que du point de vue expérimental. Cette analyse sort du cadre de notre travail, mais nous croyons qu'une mesure méthodique du déplacement ϵ_{1S} pour les transitions K_α et K_β de π^-H en fonction de la pression de la cible devrait lever le désaccord entre la mesure de 1985 et celle de 1990.

V.3 Spectromètre: possibilités actuelles et améliorations envisageables

V.3.1 Réponse instrumentale

Nous pouvons quantifier la réponse instrumentale de notre spectromètre à partir du spectre de calibration en position représenté dans la figure 73 du § IV.3.2. Ce spectre nous permet de déterminer la résolution pour l'ensemble des cristaux: 3 eV *FWHM* environ pour la raie K_α de l'argon à 2.96 keV. Cette résolution est insuffisante pour mesurer l'élargissement d'interaction forte Γ_{1S} que nous avons estimé à environ 0.7 eV (voir relation (27) § I.3.4). Il faudrait diminuer la largeur instrumentale d'un facteur 3.

La réflectivité au pic a été calculée par W. Volken (cf. réf. [83]), elle vaut 8%. Nous pouvons ainsi estimer la réflectivité intégrale qui vaut environ $7.3 \cdot 10^{-5}$ rad.

Il est intéressant de comparer dans un même tableau les valeurs ci-dessus avec celles attendues théoriquement (cf. Table 5, § II.3.10) et celles obtenues lors des tests sur un seul cristal (cf. fin du § II.6).

	<i>Spectromètre 13 cristaux Ar(K_α)</i>	<i>Théorie Ar(K_α)</i>	<i>Cristal unique Cl(K_α)</i>	<i>Théorie Cl(K_α)</i>
<i>Résolution FWHM</i>	$\sim 3 \text{ eV}$	0.4 eV	0.9 eV	0.34 eV
<i>Réflectivité au pic</i>	8 %	35 %	7 %	31 %
<i>Réflectivité intégrale [rad]</i>	$7.3 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-8}$	$3 \cdot 10^{-8}$	$5.7 \cdot 10^{-8}$

Table 9: Comparaison de la réponse instrumentale du spectromètre avec les prédictions théoriques et la réponse d'un cristal unique.

Nous constatons que le spectromètre offre une résolution 7 à 8 fois moins bonne que dans le cas théorique, une réflectivité au pic 4.4 fois inférieure, mais sa réflectivité intégrale est supérieure. Dans le cas du cristal unique, testé à une énergie inférieure, la résolution est, comme on s'y attend, nettement meilleure et ne diffère plus que d'un facteur 2.7 de la valeur théorique. La réflectivité au pic est aussi 4.4 fois plus faible que celle calculée. La réflectivité intégrale mesurée avec le cristal unique est, contrairement au cas précédent, plus faible d'un facteur 2.

Remarquons que la comparaison ci-dessus se réfère au cas théorique idéal où l'on suppose les cristaux parfaits, ce qui n'est pas vrai pour un spectromètre réel, surtout lorsque comme le nôtre celui-ci se compose de 13 cristaux. Si nous comparons directement les résultats de la mesure sur un cristal unique avec ceux de la mesure sur le spectromètre complet (cette procédure n'est pas tout-à-fait correcte car les deux mesures sont effectuées à des énergies légèrement différentes), nous aurons une vision plus réaliste de notre instrument. Bien que l'ajustement des 13 cristaux n'ait pu être fait de manière rigoureuse par manque de temps, nous constatons que la résolution du spectromètre n'est inférieure à celle du cristal unique que d'un facteur 3.

Lors d'une mesure successive avec le même instrument (décembre 1989), les 13 cristaux ont été réalignés et on a obtenu ainsi une résolution proche de 2.5 eV à 2.96 keV. Il semble toutefois difficile d'améliorer encore cette résolution sans des modifications importantes au niveau des cristaux. Nous proposons quelques améliorations possibles dans le paragraphe suivant.

V.3.3 Détecteurs CCD

Nous n'avons que peu de commentaires à ajouter concernant le système de détection qui a répondu à notre attente au delà de toute espérance. Les CCD semblent être des détecteurs particulièrement bien adaptés à ce type d'expérience. Leur pouvoir de réjection du bruit de fond (sans coïncidence) est très impressionnant (voir résultats des mesures directes § IV.3.7) et autorise leur utilisation dans des expériences à très faible taux de comptage. Leur efficacité est bonne à basse énergie ($\sim 50\%$ à 2.6 keV) et ils montrent une très bonne résolution en énergie ($\sim 170\text{ eV}$ à 3 keV). De plus, leur excellente résolution spatiale bidimensionnelle ($22\text{ }\mu\text{m} \times 22\text{ }\mu\text{m}$) en fait des instruments idéaux pour les mesures de distribution spatiale de rayons X de faible énergie.

V.4 Conclusion

Ce travail représente une première étape dans le développement d'un nouvel instrument qui, nous en sommes convaincus, permettra de déterminer de manière univoque les longueurs de diffusion d'onde S a_1 et a_3 de πN grâce à la mesure du déplacement ε_{1S} et de l'élargissement Γ_{1S} d'interaction forte du niveau $1S$ de $\pi^- H$. Cette première version du spectromètre a déjà rempli en grande partie les objectifs que nous nous étions fixés. La résolution actuelle représente un progrès d'un ordre de grandeur par rapport à la mesure réalisée en 1985, et il semble possible de l'améliorer encore.

Il est clair que l'assemblage des cristaux n'est pas seul responsable du succès de cette expérience. D'autres éléments y ont contribué de manière décisive: la trappe anticyclotron qui a permis d'augmenter fortement le taux d'événements produits, les détecteurs CCD utilisés de manière originale en développant un système électronique adapté à la mesure de rayons X, le système mécanique de positionnement extrêmement précis et, finalement, les programmes d'ordinateur de contrôle et d'analyse.

Les bases sont donc jetées dans la perspective de la mesure de Γ_{1S} , mesure qui devrait trouver son épilogue en 1992. Nous avons l'espoir que notre travail aura apporté une petite contribution à cette belle aventure.

V.3.2 Cristaux de Si(111)

Comme nous l'indiquions ci-dessus, une résolution instrumentale de ~ 3 eV est insuffisante pour mesurer l'élargissement d'interaction forte ($\Gamma_{1S} \approx 0.7$ eV). Dans la perspective d'une prochaine tentative de détermination de Γ_{1S} , nous suggérons quelques idées susceptibles d'améliorer la résolution instrumentale jusqu'à ~ 1 eV. En effet, nous avons pu constater lors du test individuel de chaque cristal que certains cristaux présentaient une résolution meilleure que 1 eV, alors que d'autres montraient une réponse nettement moins bonne. Nous pensons que ces différences proviennent essentiellement de la qualité de la courbure des supports des cristaux qui n'était de loin pas idéale (voir § II.5.1) et peut être aussi des cristaux eux-mêmes, dont on ne peut certifier qu'ils répondent tous de manière identique.

Il s'agit donc dans un premier temps de s'assurer de la parfaite régularité de la courbure sphérique des supports et de rejeter systématiquement tout support dont la qualité est insuffisante. L'étape suivante consiste à coller les cristaux sur leur support aussi soigneusement que possible (voir § II.5.3). Nous proposons ensuite de tester chaque cristal individuellement et de ne conserver pour l'assemblage final que ceux dont la résolution est inférieure à 1 eV. Cette procédure n'a pu être suivie dans notre cas, les cristaux ne nous étant parvenus que très peu de temps avant l'échéance de la période de faisceau qui nous était allouée. Finalement, chaque cristal étant orientable indépendamment des autres, et les CCD donnant une image bidimensionnelle précise de leur réponse, il vaut la peine de consacrer un certain temps à ajuster finement l'orientation de ces cristaux dans le but d'obtenir la résolution souhaitée (≤ 1 eV), résolution qui nous paraît dans le domaine du possible.

Une dernière remarque (importante) concernant les cristaux. Tout au long de l'étude théorique du spectromètre, nous avons dimensionné les divers éléments dans la perspective de la mesure de la transition $2P-1S$ et non $3P-1S$ de π^-H . Les rayons de courbure des cristaux ont donc été calculés sous l'hypothèse d'un angle de Bragg de 53° et non de 43° . Il résulte de cette différence une défocalisation au niveau des détecteurs qui élargi la réponse de manière importante. Nous avons évalué l'effet de cette aberration géométrique supplémentaire à une ouverture angulaire correspondant à environ 0.5 eV pour les cristaux placés aux extrêmes de l'assemblage (voir fig. 39, rayons de courbure 2920 et 3080 mm). Cette contribution à la largeur instrumentale n'est donc pas négligeable, mais n'explique pas la résolution de 3 eV obtenue. Nos remarques précédentes concernant la qualité de la courbure sphérique des cristaux demeurent donc valables.

Remerciements

Ce travail de thèse n'aurait pu être mené à bien sans la précieuse collaboration et le dévouement de nombreuses personnes. Je désire leur exprimer ici toute ma gratitude.

Je remercie de tout coeur Eric Bovet, qui plus qu'un directeur de thèse, a été pour moi un guide et un ami indispensable. Son soutien, ses encouragements constants et ses grandes compétences m'ont permis d'achever ce travail.

Mes remerciements vont également aux professeurs Jean-Luc Vuilleumier et Eric Jeannet qui m'ont permis d'effectuer ce travail dans leur groupe.

J'ai pu compter sur l'encadrement sans failles de Denise Bovet et Jean-Pierre Egger, ainsi que sur les explications théoriques de Jean-François Germond auquel je dois aussi la maîtrise du traitement de texte $\text{\LaTeX}$ utilisé pour rédiger cette thèse. Que ces amis trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude.

Je tiens à remercier le professeur Yves Baer qui nous a expliqué sa méthode originale de collage des cristaux.

Je salue la disponibilité de Christian Nussbaum que j'ai souvent dérangé pour qu'il résolve les problèmes informatiques qui se présentaient à tout moment.

Merci à Daniel Varidel et Dominique Schenker pour leur fantastique travail sur les CCD.

Merci à tous les membres de l'atelier de mécanique pour leur indispensable contribution.

Merci au personnel technique et administratif de l'Institut de Physique pour sa disponibilité et sa bienveillance, et pour les charmants sourires féminins que déjà je regrette.

Notre équipe de l'Institut de Physique de Neuchâtel s'est alliée pour la circonstance au groupe du professeur Hans-Jörg Leisi de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Zürich (Institut für Mittelergergiephysik). Je le remercie sincèrement pour son excellent esprit de collaboration et je remercie les joyeux membres de son équipe qui ont contribué à rendre agréable cette collaboration: Walter Beer, Peter Goudsmit, Jalil Rusi El Hassani, Jean-François Gilot, William Volken, Stefan Thomann, Daniel Sigg et Marin Bogdan.

Ma reconnaissance va également à Leo Simons, qui a mis à notre disposition la trappe anticyclotron, et à Kurt Gabathuler, véritable spécialiste des cibles. Tous deux collaborent au Paul Scherrer Institut à Villigen.

Un grand merci aux techniciens Leo Knecht et Bruno Leoni, qui ont réalisé quelques miracles sur le site expérimental, et au personnel administratif du PSI toujours accueillant et disponible.

Je remercie les personnes suivantes pour avoir accepté de faire partie du jury de thèse: Eric Bovet, Prof. Jean-Luc Vuilleumier, Prof. Hans-Jörg Leisi et Jean-Pierre Egger.

La majeure partie des dessins apparaissant dans cette thèse ont été mis sous une forme publiable par Bernard Ducommun qui m'a soulagé de ce gros travail. Je lui exprime ici toute ma reconnaissance.

D'autres personnes m'ont également aidé dans la réalisation des dessins. Il s'agit de Jean-Luc Condé, Stéphane Furter et Raphaël Wäcker, tous trois apprentis dessinateurs à l'Ecole des Métiers de St-Imier, ainsi que de Frédéric Von Allmen, collaborateur scientifique à l'Ecole d'Ingénieurs de St-Imier. Je remercie toutes ces personnes pour leur collaboration.

Je m'en voudrais d'oublier les amis et collègues assistants de l'Institut de Physique qui m'ont entouré tout au long de ce travail, contribuant par leur présence à le rendre agréable.

Enfin, toute ma gratitude va à Arlette, mon épouse, et Damien, notre enfant, qui ont supporté vaillamment mon interminable indisponibilité.

Pour conclure, je remercie le Fonds National de la recherche Scientifique qui a financé en partie ce travail.

En souvenir.....

..... William Volken

William était un virtuose de l'aile Delta.

Il jouait avec le vent dans un merveilleux ballet que le commun des mortels ne peut que rêver.

Un jour de janvier 1990 son aile s'est brisée et William s'est envolé.

A jamais.

Reste de lui le souvenir d'un sourire et de son amitié.

Cette thèse lui est dédiée.

Références

- [1] E. Bovet et al., Nucl. Instr. and Meth. **190**(1981)613.
- [2] E. Bovet et al., Phys. Lett. **153B**(1985)231.
- [3] R. Koch and E. Pietarinen, Nucl. Phys. **A336**(1980)343.
- [4] Landolt and Börnstein, Vol. **9b2**(1983)278.
- [5] D.H. Fitzgerald et al., Phys. Rev. **C34**(1986)619.
- [6] R. Koch, Karlsruhe Preprint TKP 85-5, July 1985.
- [7] J. Gasser and H. Leutwyler, Phys. Lett. **125B**(1983)321.
Ann. Phys. (NY) **158**(1984)142.
Nucl. Phys. **205B**(1958)465,517,539.
J. Gasser, Proc. of the Int. Conf. on a European Hadron Facility, Mainz, 1986,
ed. F. Scheck.
- [8] U. Wiedner et al., Phys. Rev. Lett. **58**(1987)648.
- [9] F. Scheck, *Leptons, Hadrons and Nuclei*, Elsevier Science Publ., New-York, 1983.
- [10] S. Gales et Nguyen Van Giai, *Symétrie d'isospin et structure nucléaire* in SYMETRIES ET PHYSIQUE NUCLEAIRE, Ecole Joliot-Curie de Physique Nucléaire 1986, Maubuisson, France. Disponible à l'IN2P3, au CEA et au CERN.
- [11] J.-P. Egger, *Chapitres choisis de physique nucléaire*, Institut de Physique de l'Université, CH-2000 Neuchâtel, 1987.
- [12] J. Gasser, Nucl. Phys. **B279**(1987)65.
- [13] J. Gasser, Proc. of the 2nd Int. Workshop on πN Physics, Los Alamos 1987, W.R. Gibbs and B.M.K. Nefkens eds.: Los Alamos report LA-11184-C (1987).
- [14] J. Gasser, H. Leutwyler, M.P. Locher and M.E. Sainio, Phys. Lett. **213B**(1988)85.
- [15] R. Koch, Zeit. Phys. **C15**(1982)161.
- [16] S. Deser et al., Phys. Rev. **96**(1954)774.
- [17] J.-F. Germond, communications privées.
- [18] E. Bovet et J.-P. Egger, communications privées.

- [19] J. Spuller et al., Phys. Lett. **67B**(1977)479.
- [20] G. Backenstoss, *Pionic Atoms* in Ann. Rev. of Nucl. Sci. **20**(1970)467.
- [21] H.J. Leisi, *Exotic Atom Spectroscopy Using Bent Crystals* in Proc. of the 1st Course of the Int. School of Phys. of Exotic Atoms, Erice, 1977, p. 75.
- [22] G.A. Rinker, *Exotic Atoms à la carte*, Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande, Institut de Physique de l'Uni. de Fribourg, CH-1700 Fribourg, semestre d'été 1985.
- [23] M. Leon and H.A. Bethe, Phys. Rev. **127**(1962)636.
- [24] M. Leon and R. Seki, Nucl. Phys. **A282**(1977)445.
- [25] M. Leon and J.H. Miller, Nucl. Phys. **A282**(1977)461.
- [26] L. Bracci and G. Fiorentini, Il Nuovo Cimento **43A**(1978)9.
- [27] E. Borie and M. Leon, Phys. Rev. **A21**(1981)1460.
- [28] J.S. Cohen et al., Phys. Rev. **A24**(1981)33.
- [29] G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, The Benjamin / Cummings Publ. Co., USA, 1978.
- [30] E.R. Cohen and B.N. Taylor, Rev. Mod. Phys. **59**(1987)1138.
- [31] B. Jeckelmann, *New Precision Determination of the π^- Mass from Pionic X-Rays*, Thesis, Institut de Physique Uni. Fribourg, 1986.
B. Jeckelmann et al., Phys. Rev. Lett. **56**(1986)1444.
- [32] R.P. Feynman, *QED, The Strange Theory of Light and Matter*, Princeton University Press, 1985.
- [33] E. Borie and G.A. Rinker, Rev. Mod. Phys. **54**(1982)67.
- [34] L.W. Fullerton and G.A. Rinker, Rev. Mod. Phys. **54**(1976)1283.
- [35] K.-N. Huang, Phys. Rev. **A 14**(1976)1311.
- [36] P. Vogel, At. Data and Nucl. Data Tables **14**(1974)599.
- [37] J.D. Bjorken and S.D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, Mc Graw-Hill Book Company, New-York, 1964.
- [38] T.E.O. Ericson and J. Hüfner, Nucl. Phys. **B47**(1972)205.
- [39] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique Quantique*, Tome II, p. 1270, Hermann, Paris, 1980.

- [40] J.F. Crawford et al., *Precision Measurement of the Mass Difference $m_{\pi^-} - m_{\pi^0}$* , PSI Report PR-88-05, March 1988.
- [41] E. Bovet, W. Beer et al., *Crystal Diffraction of Pionic Hydrogen and Deuterium X-Rays*, Proposal for an Experiment at SIN, R 86-05.1, 1986.
- [42] D. Taqqu, *Molecular Effects in Muonic Hydrogen Cascade*, PSI Report PR-88-15, July 1988.
- [43] A. Burek, *Crystals for Astronomical X-Ray Spectroscopy*, Space Instruments, vol. 2,(1976)53-104.
- [44] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley, New-York, 1971.
- [45] A. Guinier, *Théorie et pratique de la radiocristallographie*, Dunod, Paris, 1956.
- [46] A.H. Compton and S. Allison, *X-Rays in Theory and Experiment*, Van Nostrand, New-York, 1935.
- [47] R.W. James, *The Optical Principles of The Diffraction of X-Rays*, G. Bell and Sons Ltd, London, 1954.
- [48] W.H. Zachariasen, *The Theory of X-Ray Diffraction in Crystals*, Dover, New-York, 1967.
- [49] C.G. Darwin, Phil. Mag. 27(1914)315 et 27(1914)675.
- [50] J.A. Prins, Zeit. für Physik 63(1930)477.
- [51] P.P. Ewald, Ann. der Physik 49(1916)1, 49(1916)117 et 54(1917)519.
- [52] P.A. Doyle and P.S. Turner, Acta Cryst. a24(1968)390.
- [53] D.T. Cromer and D. Libermann, J. of Chem. Phys. 53(5)(1970)1891 et *Relativistic Calculation of Anomalous Scattering Factors for X Rays*, LASL Rept. LA-4403, 1970.
- [54] Atomic Data and Nuclear Data Tables, 27(1)(1982).
- [55] A. Krüger and H. Stephanik, Kristall und Technik 12(3)(1977)269.
- [56] S. Kikuta, Phys. Stat. Sol.(b) 45(1971)333.
- [57] P.B. Hirsch and G.N. Ramachandran, Acta Cryst. 3(1950)187.
- [58] S.W. Wilkins, Acta Cryst. A34(1978)343.
- [59] F. Miller, Phys. Rev. 47(1935)209.
- [60] D.W. Berreman, Phys. Rev. B 19(2)(1979)560.

- [61] H.H. Johann, Zeit. für Physik **69**(1931)185.
- [62] T. Johansson, Zeit. für Physik **82**(1933)507.
- [63] R.K. Smither, Rev. Sci. Instr. **53**(2)(1982)131.
- [64] F. Van Langevelde et al., Nucl. Instr. and Meth. **A257**(1987)436.
- [65] E. Bovet, communication privées.
- [66] Fisba Optik AG, CH-9000 St-Gall, Suisse.
- [67] Dr A. Huizing, Philips Research Laboratories, P.O. Box 80.000, NL-5600 JA Eindhoven, The Netherlands.
- [68] G. Wallis and D.I. Pomerantz, J. Appl. Physics **40**(10)(1969)3946.
- [69] R. Anthony, J. Appl. Physics **54**(5)(1983)2419.
- [70] Prof. Yves Baer, communications privées.
- [71] E. Bovet et al., Nucl. Instr. and Meth. **190**(1981)613.
- [72] E. Bovet et al., Phys. Lett. **153B**(1985)231.
- [73] G. Fiorucci and E. Bovet, Nucl. Instr. and Meth. **A239**(1985)635.
- [74] F. James and M. Roos, Programme MINUIT, CERN Computer Centre Program Library, ref. D506, lib. GENLIB.
- [75] E. Storm and H.I. Israel, Nucl. Data Tables, **A7**(1970)565.
- [76] M.O. Krause and J.H. Oliver, J. Phys. Chem. Ref. Data, **8**(2)(1979)329.
- [77] J. D. E. Beynon and D. R. Lamb, *Charge-Coupled Devices and their Applications*, Mc Graw-Hill, London, 1980.
- [78] D. H. Lumb, G. R. Hopkinson and A. A. Wells, Nucl. Instr. and Meth. **221**(1984)150.
- [79] Proceedings of the International Workshop on Silicon Pixel Detectors for Particles and X-rays, Leuven, Belgium, 1988, published in Nucl. Instr. and Meth. **A275**(1989).
- [80] D. Varidel et al., *CCDs as Low Energy X-Ray Detectors, Part II: Technical Aspects*, Nucl. Instr. and Meth. **A292**(1990)147.
- [81] W. Beer, J.-P. Egger et al., Interim Report for Experiment R 86-05, PSI, March 1990.

- [82] L. Simons, *Physica Scripta* 22(1988)90.
- [83] W. Volken, *X-Ray Intensities for the $\pi^- - p$ Experiment*, ETHZ-IMP Internal RP-89-02, July 1989.
- [84] A.J. Rusi El Hassani et al., *Determination of K-X-Ray Yields in Pionic Hydrogen as a Function of Gas Pressure*, Contribution to the International School of Exotic Atoms, Erice, 1989.
- [85] EEV (English Electric Valve), Waterhouse Lane, Chelmsford, Essex CM1 2QU, England.
- [86] G. Fiorucci et al., *CCDs as Low Energy X-Ray Detectors, Part I: General Description*, Nucl. Instr. and Meth. A292(1990)141.
- [87] W. Beer, PSI, communications privées, 1988.
- [88] E. Richard Cohen et al., *Fundam. Phys. Constants*, RISC and NBS, U.S.A., 1986.
- [89] D. Deslattes et al., *Atomic Innershell Physics 1985*, corrigés pour tenir compte des nouvelles valeurs des facteurs de conversion (voir [88]).
- [90] W. Beer, J.P. Egger et al., *Determination of the Strong Interaction Shift in Pionic Hydrogen with a High Resolution Crystal Spectrometer System*, october 1990, submitted for publication.

Annexes: publications

1. G.Fiorucci, J.-P.Bourquin, D.Bovet, E.Bovet, J.-P.Egger, C.Hêche, C.Nussbaum, D.Schenker, D.Varidel and J.-M.Vuilleumier:
CCDs AS LOW-ENERGY X-RAY DETECTORS, I. General description
Publié dans: Nucl. Instr. and Meth. **A292**(1990)141-146
2. D.Varidel, J.-P.Bourquin, D.Bovet, G.Fiorucci and D.Schenker:
CCDs AS LOW-ENERGY X-RAY DETECTORS, II. Technical aspects
Publié dans: Nucl. Instr. and Meth. **A292**(1990)147-155
3. G.Fiorucci and E.Bovet:
A SIMPLE CHARGED-PARTICLE-DISCRIMINATING X-RAY DETECTOR
Publié dans: Nucl. Instr. and Meth. **A239**(1985)635-638

CCDs AS LOW-ENERGY X-RAY DETECTORS

I. General description

G. FIORUCCI *, J.-P. BOURQUIN, D. BOVET, E. BOVET, J.-P. EGGER, C. HÊCHE, C. NUSSBAUM, D. SCHENKER, D. VARIDEL and J.-M. VUILLEUMIER

Institut de Physique de l'Université, CH-2000 Neuchâtel, Switzerland

Received 1 November 1989 and in revised form 25 January 1990

The command and readout system, performances and use of commercially available X-ray charge-coupled devices (CCDs) is described. The CCDs are used as soft X-ray detectors, either directly near an X-ray source or in the focal plane of a curved Si-crystal spectrometer.

1. Introduction

X-ray crystal diffraction spectroscopy has been widely used [1] in situations where very high resolution is required, such as nuclear spectroscopy, atomic, muonic and pionic atoms. In a conventional arrangement, the detector is located behind a moving slit in the focal plane of the spectrometer and consists of either a solid-state detector [Ge(Li), Si(Li), high-purity Ge] for medium-energy X-rays or a gas proportional counter for low-energy spectroscopy. If a fixed curved focussing crystal assembly is available, no slit is necessary. Such a setup has been used in a first energy measurement of the 2P–1S (2.43 keV) X-rays of pionic hydrogen atoms at LAMPF [2] and at PSI (SIN) [3]. The detector was a position-sensitive charged-particle discriminating proportional counter [4]. Our aim to also measure the narrow width (≈ 0.6 – 1.2 eV FWHM) of the 1S level of π^- H and π^- D atoms needs a detection system of utmost resolution, capable of discriminating low-counting-rate events from a high background. These requirements prompted us to look at charge-coupled device (CCD) detectors as an ideal instrument in the focal plane of our Si curved-crystal spectrometer.

This paper describes the advantages of using such devices in section 2; in section 3 we then give a general description of the electronics and of how the CCDs are operated. The performances of a P8603 GEC (EEV) CCD are presented in section 4, together with a comparison with a conventional Si(Li) detector used in the same environment. Section 5 presents some conclusions.

A connected paper [5] describes more detailed technical aspects of the CCDs, as well as specific problems appearing in the handling of the data.

2. CCDs as X-ray detectors

The most widely used imaging detectors in the soft and tender X-ray (1–10 keV) energy region are charge-coupled devices (CCDs), microchannel plates (MCPs) and proportional counters (PCs). Although used in general at higher energies, Si(Li) detectors may also work in this energy range.

The advantages of using CCDs lie in their excellent intrinsic position resolution (in our case $22\ \mu\text{m}$) together with a good energy resolution (≈ 4 – 12% of $\Delta E/E$ FWHM), good efficiency and interesting background-rejection capabilities. The strongly energy-dependent CCD efficiency which presents a maximum near 2.5 keV could be further improved by using deep-depletion CCDs. In addition, as will be shown in section 4, background of gammas, neutrons and their secondary charged particles can be rejected efficiently. However, X-ray CCDs have to be operated at $\sim 100^\circ\text{C}$ and require a sophisticated electronic readout system.

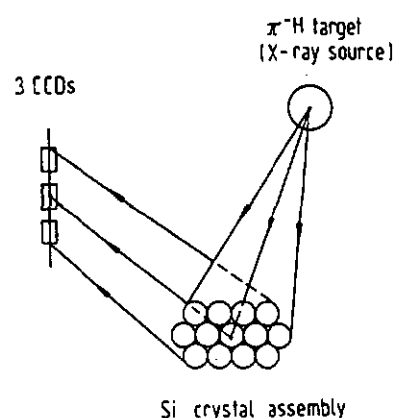


Fig. 1. Schematic view of the crystal spectrometer (not to scale).

* In partial fulfillment of the requirements for the degree "Dr ès Sciences" of the University of Neuchâtel.

Microchannel plates (MCPs) on the other hand, although also having excellent spatial resolution, have no energy resolution and poor efficiency ($\approx 25\%$). The lack of energy resolution also hampers any attempt of background suppression.

Proportional counters (PCs) have excellent efficiency ($> 90\%$) but the spatial resolution is more than an order of magnitude worse than for CCDs and the energy resolution is moderate ($\approx 15\%$ of $\Delta E/E$ FWHM). Furthermore, these detectors have no intrinsic background-rejection capabilities. Therefore, in order to reduce background, special layouts and geometries have to be built [4].

In our spectrometer, three CCDs were used in the elongated focal plane as shown in fig. 1.

3. General description of the command and readout system

Fig. 2 shows the CCD setup. Each P8603 CCD, $12.7 \times 8.5 \text{ mm}^2$ in size, consists of a matrix of 576×385 pixels, $20 \text{ } \mu\text{m} \times 20 \text{ } \mu\text{m}$ each, separated by a gap of a 2

μm . The three CCDs are placed as close as possible to each other. However, the hardware constraints did not allow a spacing less than 7.3 mm between the sensitive areas of each CCD. The devices are cooled down to -100°C with liquid nitrogen and a cold finger and run in a vacuum of $\approx 10^{-5}$ mbar. Temperature is stabilized by a regulating system. The block diagram of the command and readout system is given in fig. 3. The electronics mounted near the CCDs generates the phase signals for line transfer and point transfer of the charge content of the pixels. The output signal is processed by a dual slope integrator and digitized by a 12-bit analog-to-digital converter (ADC). The command box (programmable interface unit) generates command signals and power for the phases, the CCDs, the readout circuit and the ADC. The CCD controller in the CAMAC crate communicates with the CCDs through the command box. In addition, the CAMAC crate contains a buffer memory for each CCD. The CAMAC crate controller is a Kinetic Systems 3922 parallel bus crate controller connecting with the IBM PS/2 80 personal computer. Furthermore, a NIM module allows for vacuum control and temperature control and regulation.

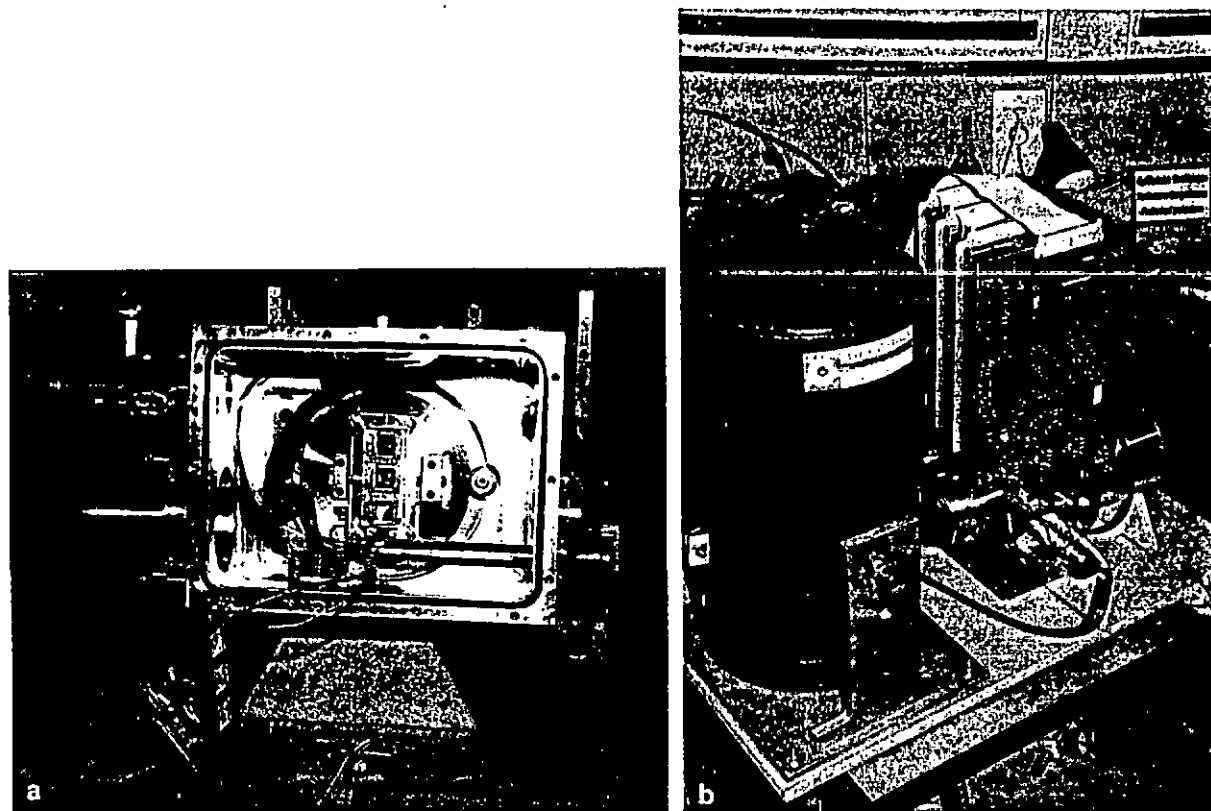


Fig. 2. (a) View from upstream (crystal spectrometer) of the three CCDs in their vacuum box. (b) View of the CCD setup. X-rays enter from the right. The 15 liter liquid-nitrogen tank on the left and the charge transfer and output electronics boards on top of the CCD vacuum box are visible.

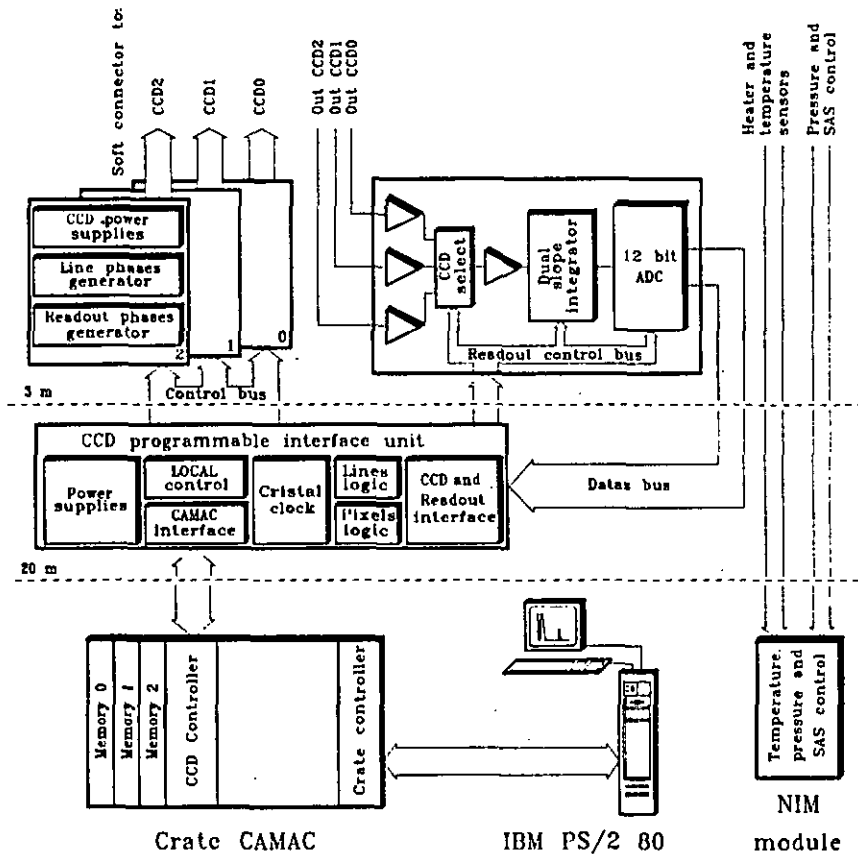


Fig. 3. Block diagram of the CCD electronics. This diagram consists of three parts. The power supplies, line and readout phases generator, slope integrator and 12-bit analog-to-digital converter (ADC) are directly mounted next to the three CCDs, numbered 0, 1 and 2. The CCD command box (programmable interface unit) is located at 3 m distance. The data acquisition and control system, at approximately 20 m from the CCDs, is an IBM PS/2 80 personal computer, together with a CAMAC crate and a NIM module for temperature and vacuum control.

A full and detailed description of the charge transfer sequence, signal levels, etc. is presented in a connected paper [5].

Data taking starts by first resetting the pixels of the CCDs which are then in data acquisition mode (accumulating charge). Data acquisition time is limited mainly by dark current and the number of hit pixels. In our case, depending on background conditions, measurements of up to several hours are possible. At the end of a measurement the 576×385 matrices with their corresponding ADC values are transferred into the buffer memory and then stored on the PS/2 disk. Total transfer time per CCD for CCD $\rightarrow$ PS/2 disk is 40 s.

4. Performance of P 8603 CCDs and comparison with conventional X-ray detectors

Results from our tests in the 0.5–8 keV energy region will be discussed, emphasizing the relations be-

tween energy resolution, efficiency and background rejection.

The position resolution is obviously excellent. It is given by the $22 \mu\text{m} \times 22 \mu\text{m}$ size of the individual pixel. An excellent position resolution is important in the normal running mode with the CCDs in the focal plane measuring the Bragg angle of the X-rays refracted by the Si-crystal assembly. A good energy resolution is then only used as a constraint to reduce background.

An example of the energy resolution achieved is presented in fig. 4. The best energy resolution $\Delta E/E$ of 5.8% FWHM obtained at 2.96 keV and 4.0% FWHM at 5.9 keV corresponds to an intrinsic resolution of ≈ 180 eV FWHM, a noticeable result that could be improved further with an increased depletion layer and back-illumination [6]. This would also improve the efficiency, especially in the upper part of our energy range.

The CCD efficiency was tested by comparing X-rays from different sources detected with the CCDs and two gas proportional counters of known efficiency (xenon

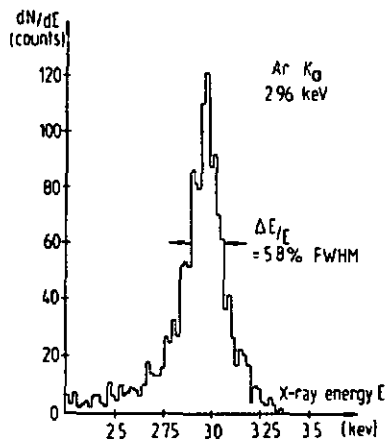


Fig. 4. Energy spectrum of the argon K_{α} (2.96 keV) X-ray line obtained by fluorescence of 5.9 keV ^{55}Mn X-rays on a Ar gas target. The energy resolution is 172 eV FWHM.

and argon-methane [4]). Sources used included 5.9 and 6.5 keV ^{55}Mn X-rays from a ^{55}Fe source and 2.62 and 2.96 keV X-rays obtained by fluorescence of the ^{55}Mn X-rays on polyvinylchloride (PVC) and argon gas targets. The efficiency found was approximately 60% at 2.62 keV and 15% at 5.9 keV. Furthermore, a similar CCD efficiency was obtained by direct measurement of a pionic hydrogen K X-ray spectrum with the CCDs and a Si(Li) solid-state detector (see below).

The CCD background-rejection capabilities are presented in fig. 5. They are based on a pattern-recognition software program described in section 7 of the connected paper. Indeed, in most cases, an X-ray in the 2–3 keV energy range deposits its energy in a single pixel. Charged particles, gammas and neutrons, on the other hand, are usually split into several pixels. Furthermore, as can be seen in fig. 5, gammas and neutrons are only detected with very low efficiency.

Position spectra obtained with the crystal assembly and the CCDs in its focal plane are shown in fig. 6a for the Ar X-rays (calibration source) and in fig. 6b for the 3P–1S $\pi^- \text{H}$ X-rays. The corresponding energy resolution of 2.7 eV FWHM is essentially due to crystal diffraction and may be further improved with a better alignment of the individual crystals [7].

Performances of the CCDs can be further appreciated when using them to detect direct X-rays from the source (without crystal) in a high-background environment. Indeed, their good energy resolution together with their intrinsic spatial fragmentation opens up new perspectives in X-ray detection techniques.

Comparison of a direct measurement of X-rays obtained at the PSI πE3 low-energy π^- beam in a 15 bar equivalent hydrogen target, using Si(Li) and CCD detectors, is shown in fig. 7. The spectrum of fig. 7a was taken with a Si(Li) detector of 0.3 cm^2 surface at 7 cm

from the target, in coincidence with signals from the incoming pions. The signal-to-background ratio is approximately 0.25. The total number of K X-rays is

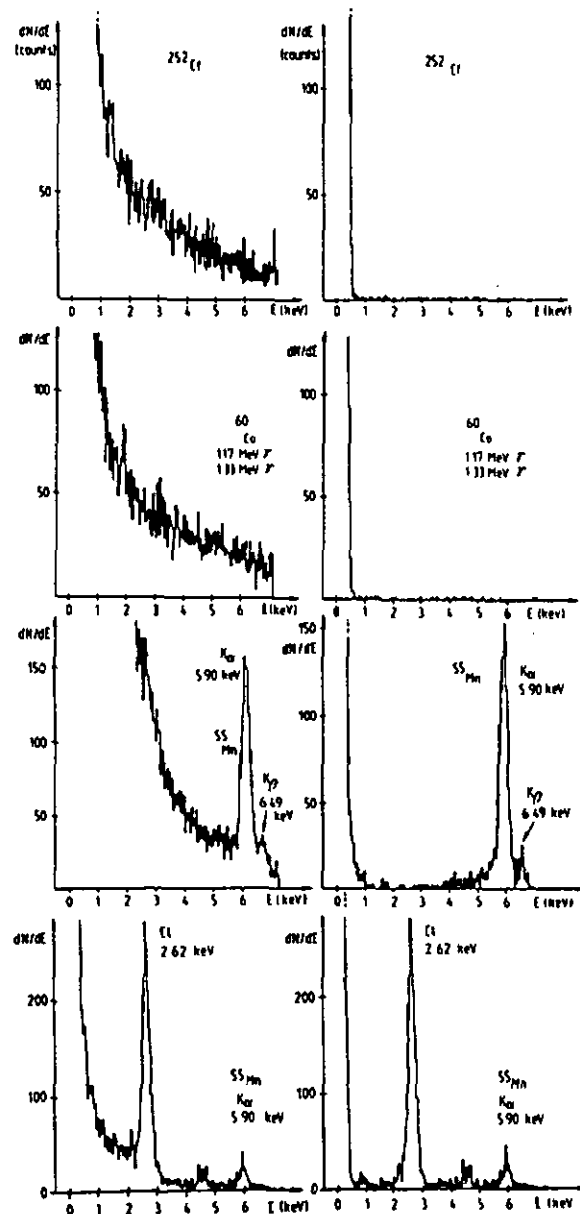


Fig. 5. Background-rejection capabilities of a P8603 CCD. This figure presents the energy spectrum between 0.5 and 7 keV before (left) and after (right) background rejection. The way to reject background is described in the text and the connected article [5]. Starting at the bottom, the figures show chlorine 2.62 keV X-rays obtained by fluorescence of 5.9 keV ^{55}Mn X-rays on a polyvinylchloride target, 5.9 and 6.5 keV ^{55}Mn X-rays directly from the ^{55}Fe source, background from a 1.17 and 1.33 MeV ^{60}Co γ -ray source and from a ^{252}Cf (neutron) source. In addition, the bottom figure also shows some 5.9 (6.5) keV X-rays coming directly from the ^{55}Fe source.

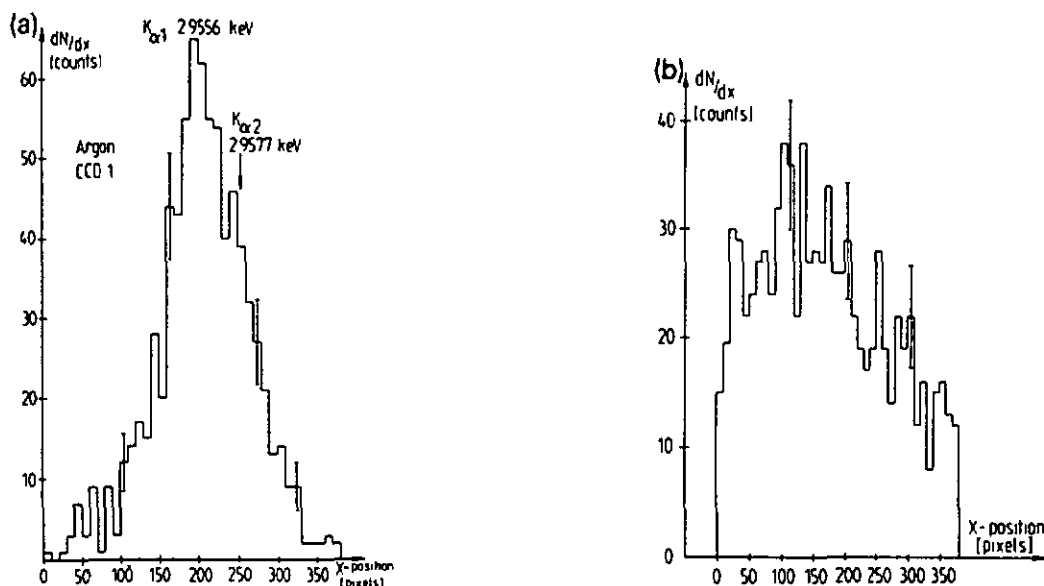


Fig. 6. (a) Position spectrum of argon X-rays (fluorescence of 5.9 and 6.5 keV ^{55}Mn X-rays) diffracted by our curved Si-crystal assembly [7] taken with the CCDs. (b) Position spectrum of π^- H 3P-1S (K_β) X-rays diffracted by our curved Si-crystal assembly [7] taken with the CCDs.

≈ 4000 counts in 13 hours. Let us note that the slits in the pion beam had to be closed in order to reduce the incoming flux by over an order of magnitude, for the Si(Li) detector to work.

The spectrum of fig. 7b was taken with the same setup and under the same conditions as that of fig. 7a. However, an additional π^0 detector (plastic scintillating fibers, double $\gamma\gamma$ coincidence, see ref. [8]) was included in the coincidence. It is evident that the signal-to-background ratio is excellent. However, the number of events is reduced to ≈ 90 counts in 13 h.

Fig. 7c shows an energy spectrum taken with our CCDs. They were positioned at 95 cm from the target and have a total surface of 3.2 cm^2 . The slits were wide open. The signal-to-background ratio is ≈ 2 . The total number of K X-rays is ≈ 640 in 3 h 20 min. Let us note that this is a free-running spectrum (no trigger or coincidence). No shielding was used. It would be perfectly possible to move the CCDs closer in order to further increase the event rate.

The comparison of these three figures (7a, b, c) presents an impressive case for the use of CCDs for this type of measurements. While often, in this field of physics, elaborate and questionable fits are necessary to extract the signal when conventional detectors are used, CCDs do not have this problem. In fact the signal-to-background ratio of even unshielded CCDs in the absence of any trigger is at least an order of magnitude better. In addition, similar or better efficiencies and energy resolutions are obtained.

The excellent signal-to-background ratio is based on a highly effective X-ray $\leftrightarrow$ charged-particle discrimination based on pattern recognitions as described in the connected article in detail.

The maximum rate in a CCD is only limited by fast filling up of a significant percentage of the pixels and therefore losing pattern-recognition capabilities. However, measurements can be shortened to a few minutes before deadtime becomes important and disk files may be added after off-line treatment.

5. Conclusions

We have shown that a stack of three P8603 CCDs can be operated reliably in the energy region 0.5–8 keV with an efficiency of approximately 50%, depending on the energy. The intrinsic position resolution of $22\text{ }\mu\text{m}$, the energy resolution of 5–10% and the low noise make these detectors ideal for our type of measurements. However, it is clear that numerous other applications exist. These include X-ray microscopy, X-ray astrophysics, synchrotron radiation, vertex detectors for particle colliders, laboratory plasma research, muon-catalysed fusion, etc., etc.

In a field where the ultimate quality of an experiment is often given by the capability to reduce background, CCDs open new and interesting perspectives.

Acknowledgements

We are particularly grateful to our colleagues W. Beer, M. Bogdan, K. Gabathuler, J.-F. Gilot, P.A.F. Goudsmit, H.J. Leisi, A.J. Rusi El Hassani, D. Sigg, L. Simons, St. Thomann and W. Volken from IMP and PSI, Villigen for their collaboration. This work was supported in part by the Swiss National Science Foundation.

References

- [1] H.E. Henrikson and F. Boehm, Nucl. Instr. and Meth. 121 (1974) 269;
G.L. Borchert et al., Nucl. Instr. and Meth. 124 (1975) 107;
W. Beer et al., Nucl. Instr. and Meth. A238 (1985) 365.
- [2] A. Forster, E. Bovet, J. Gimlett, H.E. Henrikson, D. Murray, R.J. Powers, P. Vogel, F. Boehm, R. Kunselman and P.L. Lee, Phys. Rev. C28 (1983) 2374.
- [3] E. Bovet, L. Antonuk, J.-P. Egger, G. Fiorucci, K. Gabathuler and J. Gimlett, Phys. Lett. B153 (1985) 231.
- [4] G. Fiorucci and E. Bovet, Nucl. Instr. and Meth. A239 (1985) 635.
- [5] D. Varidel, J.-P. Bourquin, D. Bovet, G. Fiorucci and D. Schenker, this issue, Nucl. Instr. and Meth. A292 (1990) 147.
- [6] D.H. Lumb, G.R. Hopkinson and A.A. Wells, Nucl. Instr. and Meth. 221 (1984) 150.
- [7] Crystals from several manufacturers were tested. The best Si crystals were obtained from Philips Research Laboratories (group of A. Huizing), 5600 JA Eindhoven, The Netherlands.
- [8] A.J. Rusi El Hassani et al., Nucl. Instr. and Meth. A290 (1990) 109.
- [9] A.J. Rusi El Hassani et al., Determination of K X-ray Yields in Pionic Hydrogen as a Function of Gas Pressure, Erice school on Exotic Atoms, Erice, 1989.

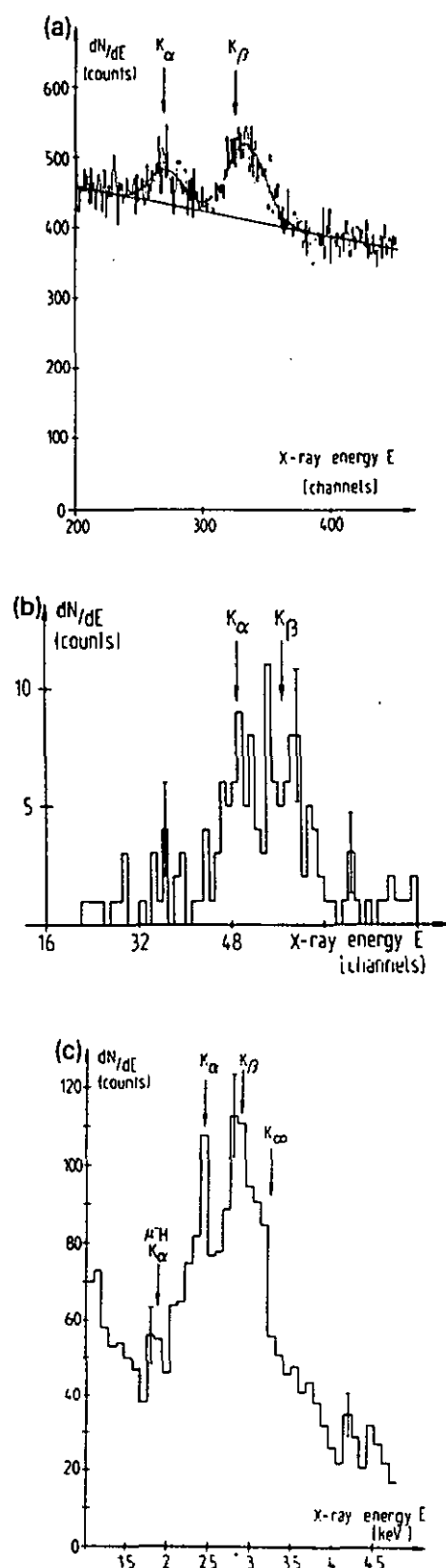


Fig. 7. (a) π^- H X-ray direct energy spectrum taken with a Si(Li) detector triggered with the signal for incoming pions. K_α corresponds to 2.43 keV and K_β to 2.88 keV [9]. (b) Same X-ray spectrum as in (a), but with an additional π^0 signal in coincidence [9]. (c) Direct X-ray energy spectrum taken with our CCD setup. The details are described in the text.

CCDs AS LOW-ENERGY X-RAY DETECTORS

11. Technical aspects

Daniel VARIDEL, Jean-Pierre BOURQUIN, Denise BOVET, Gianni FIORUCCI *
and Dominique SCHENKER

Institut de Physique de l'Université, CH-2000 Neuchâtel, Switzerland

Received 1 November 1989 and in revised form 25 January 1990

The technical aspects of a command and readout system for commercially available X-ray charge-coupled devices (CCDs) is described in detail, including handling of noise problems, interfacing (CAMAC) and X-ray identification by software. Some of the problems encountered and their solution have been emphasized.

1. Introduction

In this second paper [1] about this subject, the technical aspects of the command and charge-transfer system, the output electronics with its noise problems, dark current, CAMAC interface, engineering problems and software for particle identification and background rejection are treated in detail. Ref. [2] gives numerous instructions on how to design CCD electronics. Ref. [2] was followed in general, but many improvements or changes were made in particular aspects. For example, the block diagram for the charge-transfer system was taken over directly from ref. [2] but several changes were carried out, like the use of adjustable operational amplifiers instead of transistors for the transfer phase signals. Also, in our case special consideration of noise

and dark current was necessary. In addition, the advantages of adopting the CAMAC standard were shorter design times and a simple data acquisition program. This program is nothing more than a succession of CAMAC commands and tests. Finally, the storage and analysis of the CCD matrices on an IBM PS/2 80 PC makes the entire system easy to handle and independent of access to a large computer facility.

A section of a CCD detector is presented in fig. 1. A CCD (see fig. 2) contains an image section which is sensitive to X-rays, a line readout section and a charge detection amplifier (output) section. The charge transfer (line per line to the readout line or point per point to the output amplifier) is carried out by the charge-transfer system. The conversion of every electric point charge into a voltage pulse is done by the charge detection amplifier included in the on-chip output electronics. A command system commands the different electronic circuits.

* In partial fulfilment of the requirements for the degree "Dr ès Sciences" of the University of Neuchâtel.

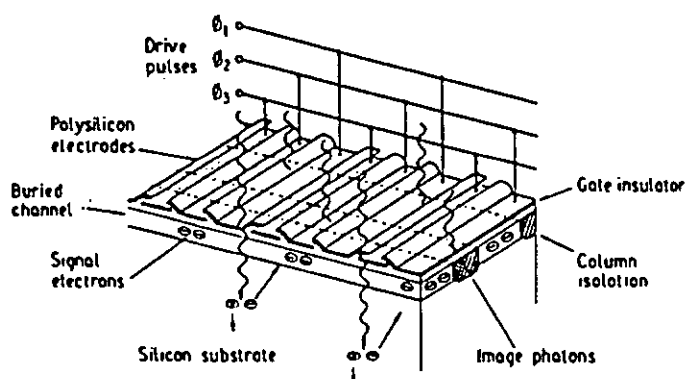


Fig. 1. Section of a CCD detector.

2. Charge-transfer and command system

The P8603 CCD consists of a 576 lines $\times$ 385 columns matrix of pixels. The charge transfer, line per line to the readout line or point per point along the column end to the output charge detection amplifier, is carried out by a three-phase system (figs. 3 and 4). The charge-transfer electronics which is located near the CCD consists of

- a circuit to generate the three phases for line transfer, I_1 , I_2 and I_3 ,
- a circuit to generate the three phases for point-per-point transfer, R_1 , R_2 and R_3 , and
- a power-supply circuit for the CCD substrate, for different polarizations and for the transistors of the output amplifier.

A typical transfer and reading sequence is given in fig. 4. Total transfer and reading time per CCD is approximately 15 s, depending somewhat on careful adjustments beforehand. The signals of the different phases have to be precise with respect to duration and position of their edges. Since the capacities between the electrodes and the substrate and between the electrodes themselves are significant, any imperfection in the phase signal crossings produces a deformation of the substrate potential and therefore of the output signal. The phases are generated by an operational amplifier mounted as integrator with adjustable voltage limits and integration

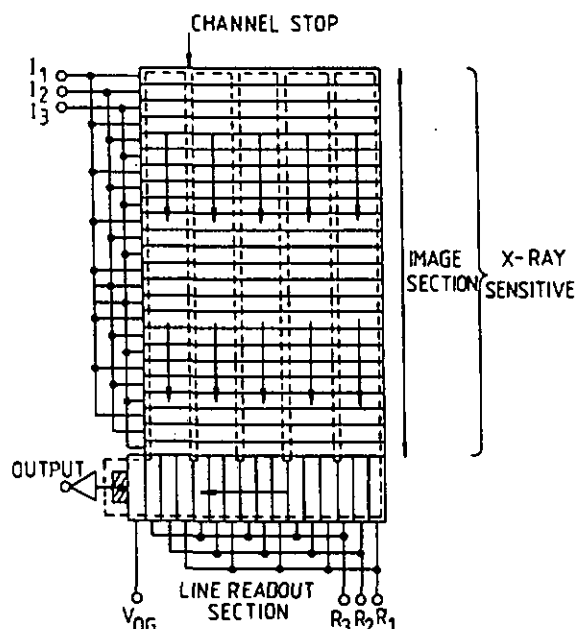


Fig. 2. Schematic view of the CCD frame transfer array: I_i = image section drive pulses, R_i = line-readout section drive pulses, V_{OG} = output gate voltage, shielding the output from the line readout section.

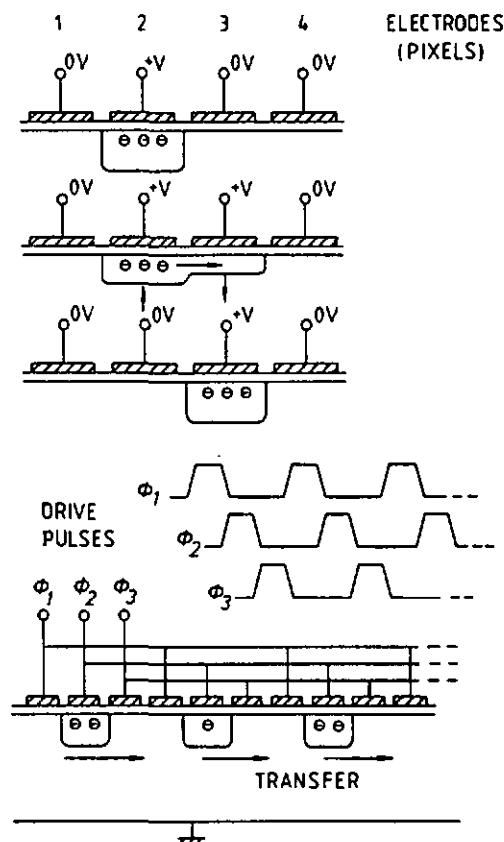


Fig. 3. Charge signal transfer from one pixel to the next. The charges are in pixel no. 2 which has a voltage level $+V$ of 10 V. The voltage of pixel no. 3 is set to the same level as that of no. 2. Simultaneously the voltage of no. 2 is reduced and the charges move to no. 3. A sequential pulsing of electrodes between two levels therefore allows a charge signal transfer over many electrodes (pixels).

current. A logic signal commands this integrator. This circuit is shown in fig. 5.

The command electronics (see fig. 3 of ref. [1]) is located in a command box separated from the CCDs by a 3 m cable. Trapezoidal transceivers (National DS 3862/DS 3882) are used to transmit the logic signals over the 3 m. The command box generates the logic signals and command signals and is a power supply for the phases, CCDs, readout circuit and analog-to-digital converter (ADC). The phase logics is handled with erasable programmable logic devices (EPLDs). This allows modifications of reading cycles without having to change any hardware.

The command box has two working modes:

- (1) local, where the CCD number, read command and the readout parameters (fast, slow, binning of lines or points and readout frequency) are chosen manually;

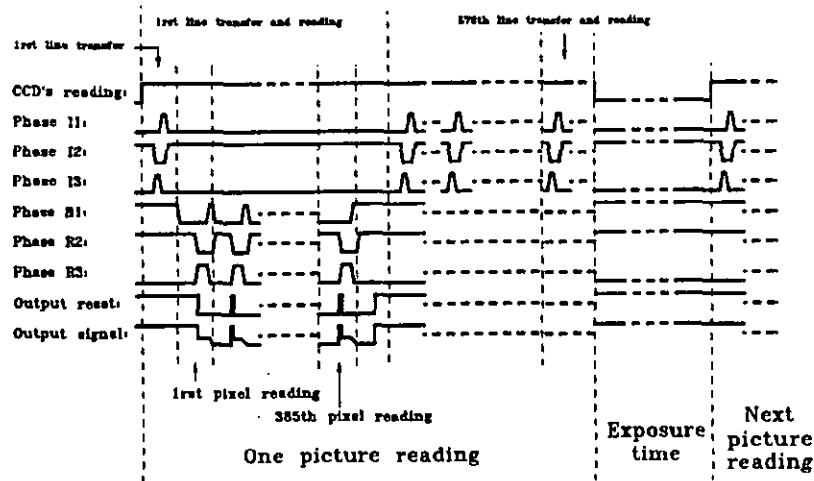


Fig. 4. CCD pulse timing diagram of transfer and readout sequence.

(2) CAMAC, where all the parameters above are specified in a data acquisition program in the IBM PS/2 connected to the system.

The 20 m cable between the command box and the CAMAC crate is galvanically decoupled (optocouplers) and also uses trapezoidal transceivers for transmitting the signals.

3. Output electronics

The P8603 on-chip charge-detection amplifier plays an important role in the operation of the CCD, since it basically transforms the CCD output charge into a signal voltage. The P8603 output circuit is presented in fig. 6. The output signal (O_s) is given by

$$e(O_s) = GQ/C_0,$$

where G is the output transistor gain $\approx 0.8-0.9$, $Q \approx$

$0.28 \text{ e}^-/\text{eV}$ and C_0 is the total capacitance $\approx 0.10-0.15 \text{ pF}$.

In order to improve the sensitivity of the charge detection, the contribution of the bias gate, $C_{AG} (\approx 0.024 \text{ pF})$, to the total capacitance C_0 is eliminated by reversing the bias gate (BG) and the reset gate (RG). This change suppresses the function of V_{AG} to minimize the effect of the reset pulse in the output and therefore a large signal appears. A clamping circuit, synchronized with the reset pulse of the dual slope integrator (see fig. 7), operates to prevent saturation of the readout electronics.

The two principal output stage noise sources are:

(1) noise associated with resetting C_0 (reset noise):

$$\overline{e_n^2} = \frac{kT}{C_0} [1 - \exp(-2T/RC_0)],$$

where $\overline{e_n^2}$ is the mean square deviation from the mean voltage, k is Boltzmann's constant, T the temperature

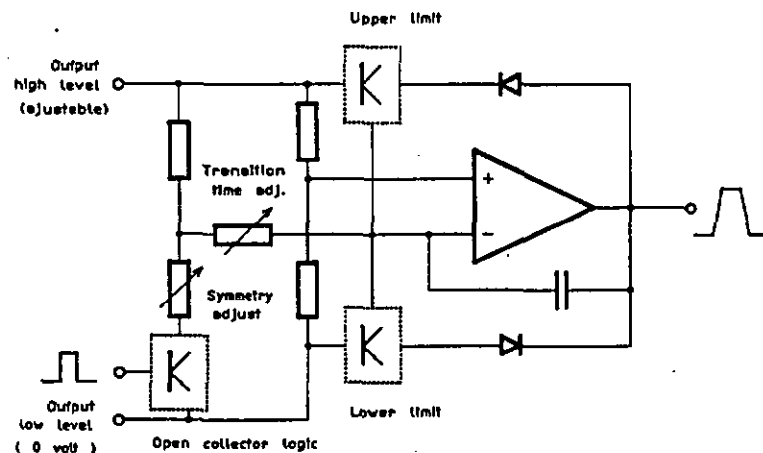


Fig. 5. Phase generator circuit. See text for details.

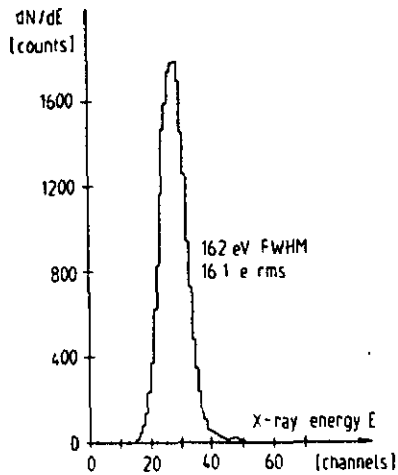


Fig. 10. Noise of the CCD and the electronics. The energy resolution is 162 eV FWHM.

162 eV FWHM. In fig. 11 the noise is given with the CCD disconnected. The energy resolution without CCD load is then 27 eV FWHM. Except for a dark-current contribution which is dependent on measuring time, almost all noise arises in the output stage, since the charge transfer is relatively noise-free with an excellent charge-transfer efficiency of 99.997% per pixel. It is clear that the energy resolution is mainly dependent on the CCD output stage and readout noise performance

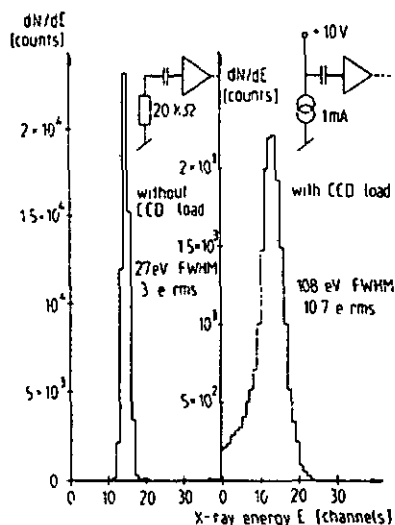


Fig. 11. Noise with the CCD disconnected. On the left, without CCD load on the output, the energy resolution is 27 eV FWHM, which is excellent. On the right, the CCD is replaced by a +10 V polarization and the load is maintained with a 1 mA current source. The energy resolution is then 108 eV FWHM. This means that most of the noise arises from either the CCD on-chip readout or from the CCD load or polarization.

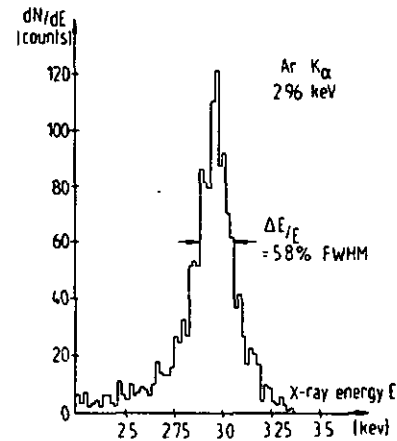


Fig. 12. Energy spectrum of the argon K_{α} X-ray line. The energy resolution is 172 eV FWHM.

and therefore on a careful adjustment and judicious interfacing of the output stage. Fig. 12 illustrates this point: the measurement of a 2957 eV argon X-ray source gives an energy resolution of 172 eV FWHM.

4. CAMAC interface

The CAMAC part consists of an ordinary CAMAC crate with a Kinetic Systems 3922 parallel-bus crate controller [3]. The system is connected to a 20 MHz IBM PS/2 80 with a hard disk of 115 Mbyte and 4 Mbyte RAM. The crate controller communicates with the PS/2 via a parallel bus and interface to the PS/2 MCA bus [3]. Transfer speed is up to 500 kbyte/s. In addition, the crate contains a two-slot-wide CAMAC module called the CCD controller and three one-slot-wide memory buffer modules (one for each CCD). The CCD controller communicates with the CCDs through a 20 m cable and the command box. A block diagram is shown in fig. 13. Here too EPLD circuits are used in order to decode the CAMAC commands, manage the buffer modules and command the CCD readout. During the readout cycle, a 12-bit word for each point, coming from the ADC, is written into the buffer modules. Then the CCD controller reads and transfers them onto the PS/2 disk. In this way, the readout speed of the CCDs does not depend on the memory access time at the PS/2. Memory addresses are organized in lines and columns as are the CCDs. Maximum is 1024 lines and 512 columns per CCD. However, this can be extended to 2048 lines and 1024 columns in order to accommodate future CCDs of larger size.

A list of all possible CAMAC commands (functions F and subaddresses A) is shown in table 1. Not all options are presently used. The F16 A8 command writes the status register. It permits to choose the CCD to be

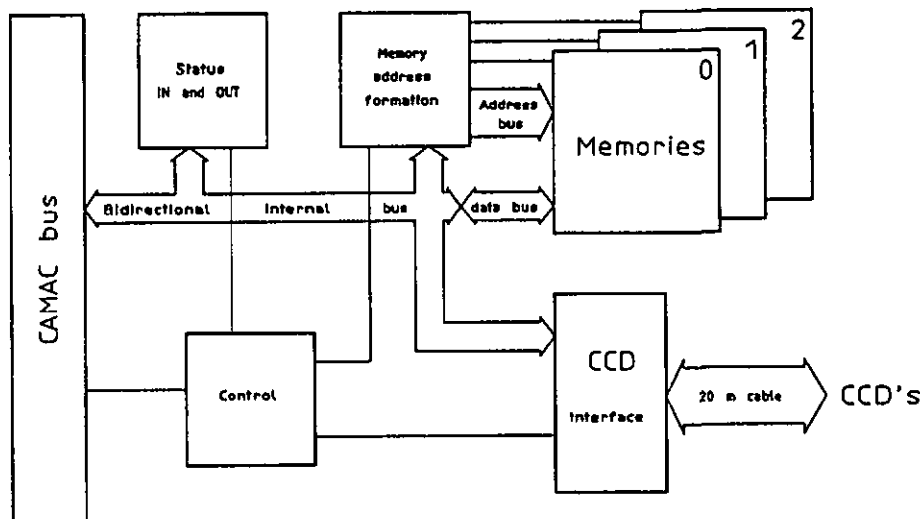


Fig. 13. CAMAC interface block diagram.

addressed, allows for some binning if desired and chooses between normal readout (at the end of a run) or "fast clear" in order to reset the pixels at the start of a run. Another status register may also be read with an F0 A8 command and busy, power-supply-control, local/CAMAC signals are available.

A typical succession of CAMAC commands in a data acquisition program is given below:

(a) *Start up (initialization):*

F9 A8 or C	clear, initialize;
F16 A8	write status register;
F16 A10, A11, A12	write counters;
F10 A12, A13, A14, A15	initialize LAMs;
F26 A8	LAM enable.

b) *CCD readout or clear:*

F12 A10, A11, A12	initialize counters;
F16 A8	write status register
	(readout or clear);
	read or clear;
F12 A8	
wait for LAM,	reinitialize LAM at end
F10 A12	of read.

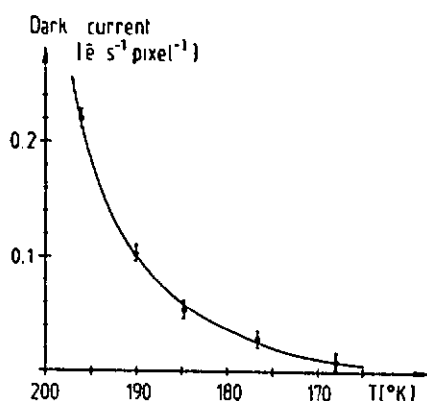


Fig. 14. Measured dark current per pixel versus temperature. Our operating temperature is -100°C (173 K). This corresponds to a dark current of $\approx 0.015 \text{ e}^{-}\text{s}^{-1}\text{pixel}^{-1}$. The curve is to guide the eye.

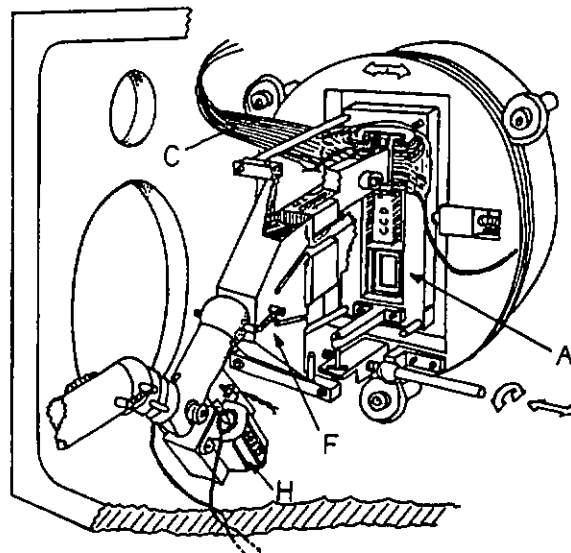


Fig. 15. CCD setup; view from the back. This part is in vacuum. A = adjustable CCD housing, C = soft connector, F = cold finger (copper), H = heater.

c) *Memory buffer readout:*

F12 A10, A11, A12 initialize counters;
F0 A0, A1, A2 readout of the three
memory-buffer mod-
ules.

times (a few hours), the devices have to be cooled down in order to reduce the dark current. Fig. 14 presents the dark current as a function of temperature. The exponential decrease follows the diode law

$$I_D = A \exp[V_{BG}/(2kT/q)],$$

5. Dark current

The thermal noise of electrons accumulated in the CCDs generates a dark current. At room temperature (20°C) a typical total dark current for a P8603 CCD of 3.5 nA results in a collection of approximately 10^5 electrons per pixel per second in addition to the photo-generated signals. A $\approx 220\,000$ pixel CCD would therefore be saturated in 2–3 s. As we need long collection

where A is a constant, $V_{BG} \approx 1.1$ V is the band gap of silicon and $kT/q = 26$ mV at 298 K.

Our operating temperature of -100°C (173 K) corresponds to a dark current of $0.015 \text{ e}^- \text{ s}^{-1} \text{ pixel}^{-1}$. In order to avoid any permanent damage to the CCDs, the operating temperature should not be kept too low (> 160 K). In addition, there is a small increase of dark current as a function of time (aging of CCD). Ideally the dark current would be uniform, but in practice there are

Table 1
List of CAMAC commands

F	A	S ₁	S ₂	Action	Q
0	0			Read CCD0	y^{a1}
	1			Read CCD1	y
	2			Read CCD2	y
	8			Read status register	y
8	12			Control of call from LIEC ^{b)}	<u>LIECM</u>
	13			Control of call from LOC ^{c)}	<u>LOCM</u>
	14			Control of call from RZG ^{d)}	<u>RZGM</u>
	15			Control of call from AEO ^{e)}	<u>AEOM</u>
9	8			General initialization + clear	1
	10			Clear point counter	y
	11			Clear line counter	y
10	12			Initialization of call from LIEC	<u>LIECM</u>
	13			Initialization of call from LOC	<u>LOCM</u>
	14			Initialization of call from RZG	<u>RZGM</u>
	15			Initialization of call from AEO	<u>AEOM</u>
12	8			Start readout or fast clear of chosen CCD	y
	10		x	Initialization point counter	y
	11		x	Initialization line counter	y
	12		x	Initialization point calculator	y
16	0	x		Write memory CCD0	y
	1	x		Write memory CCD1	y
	2	x		Write memory CCD2	y
	8	x		Write status register	y
	10	x	x	Write point counter	y
	11	x	x	Write line counter	y
	12	x	x	Write point calculator	y
24	8			LAM ^{f)} disable	1
25	10		x	increment point counter	y
	11		x	increment line counter	y
	12		x	decrement point calculator	y
26	8			LAM enable	1

^{a1)} $y = \text{LIEC}$.

^{b)} LIEC = reading in progress.

^{c)} LOC = local mode.

^{d)} RZG = general reset.

^{e)} AEO = power supply ok.

^{f)} Four LAM sources: (1) end readout or fast clear, (2) general clear and initialization, (3) local mode, (4) power supplies not ok.

some spatial variations over the CCD area due to small inhomogeneities resulting from device manufacturing. This increases the width of the noise peak and affects the energy resolution.

6. Engineering

Fig. 15 presents the CCD setup. The CCDs are separated from the upstream crystal spectrometer by a $7.5\text{ }\mu\text{m}$ Kapton foil $1.6\text{ cm} \times 6.6\text{ cm}$ in size. Whereas the crystal spectrometer works in helium at normal pressure and temperature, the CCDs work in a vacuum better than 10^{-4} mbar obtained by a forepump and a turbomolecular pump. Since the CCDs work best at a temperature of -100°C (obtained with a cold finger and stabilized with a small heater), vacuum helps avoid condensation of humidity on the CCDs which would be deadly. In addition it prolongs the interval between refills of the 15 l liquid-nitrogen container. The container needs to be refilled with liquid nitrogen every two days.

A copper cold finger with spherical movable knuckles (see fig. 15) originates from the liquid-nitrogen container and splits into three parts to reach each CCD. Near the container end, the finger diameter is adjusted after tests in order to correspond to a relatively rapid cooling-down time ($\approx 2\text{ h}$) and also a minimum of heat use for temperature regulation.

Alignment of the three CCDs in one plane is achieved by placing them in an isolated housing in a stainless-steel slab which itself is thermally and electrically isolated. The stainless-steel piece is located inside a symmetrical disk which can be adjusted in position. The CCDs are kept in their housing by the cold fingers and a system of

springs. Except for the output signal, soft connectors are used for connecting the CCD pins with the electronics.

When no liquid nitrogen is added anymore, the system warms up. It is important to disconnect the pumps only after warm-up is completed, in order to avoid condensation of humidity on the CCDs.

Finally, the system has to be absolutely light-tight, since of course the CCDs are also sensitive to visible light and therefore saturate quickly.

7. Software for X-ray $\leftrightarrow$ charged-particle identification and background rejection

In order to eliminate the background, the energy spectrum dN/dE as a function of E has to be constructed and discussed. Inspection of this spectrum tells us how to eliminate the unwanted events and deduce the X-ray position spectra.

Events are collected into the CCD for a finite time and are then read out. This collection time must not be too long, to avoid that a pixel may be hit twice during that period. The energy content of each pixel is analyzed in order to identify the X-ray event of the proper energy and thus to reject the background. In most of the cases the energy of an X-ray in the 2.5–3 keV range is deposited into one single pixel. Sometimes, however, the energy is split between two or more pixels ($\approx 30\%$ of the cases). Background events like neutrons, gammas and charged particles, on the other hand, are usually split into many pixels. This feature allows for a rather powerful rejection of the background. Indeed, a good event is characterized by an isolated pixel containing the proper energy. In order to take into account the split of the events into more than one pixel, we also consider two, three or four neighbor pixel hits surrounded by empty pixels. The sum of the energies of these pixels must also add to the correct energy. Thus we shall call:

– hit of one single pixel:

```

. . .
. x .
. . .

```

– hit of two pixels:

```

. . . . .
. x x . . x .
. . . . . x .
. . .

```

– hit of three or four pixels:

```

. . . . .
. x x . . x x . . x . . x x .
. x . . . x . . x x . . x x .
. . . . .

```

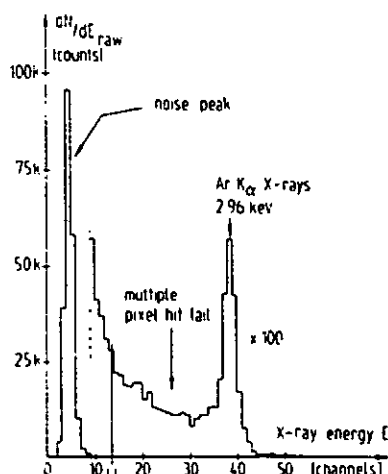


Fig. 16. Raw CCD1 energy spectrum obtained from a calibration measurement by fluorescence of 5.9 keV ^{55}Mn X-rays in an argon gas target. LL is the lower limit described in the text.

Larger pixel assemblies are eliminated. Please note that in addition every pixel has a low energy content corresponding to its noise and dark current. Thus, an empty pixel means, actually, a pixel with an energy content below a given limit.

The analysis must be carried out in two steps:

(1) Build the histogram and plot the raw energy spectrum $(dN/dE)_{\text{raw}}$ without any conditions of isolated or nonisolated pixel hits. As an example, fig. 16 presents the raw energy spectrum of a calibration measurement (argon, K_{α} line, 2.957 keV). Then the position (offset) and width (FWHM) of the noise peak are determined. Furthermore, the range of the energy peak is evaluated (energy window).

(2) The same data are analyzed again, but this time with conditions of hits of one single pixel, two and three or four pixels (see pattern above), resulting in three separate energy spectra. The lower limit (LL) of the energy content is given by (fig. 16):

$$LL = C \times \text{FWHM} - \text{offset},$$

where C is a constant for each CCD ($1.3 \leq C \leq 2.1$, depending on the CCD). Events above LL and in the correct energy window are then displayed in the final position spectra.

It is clear that some of the events between the noise peak and the energy peak (see fig. 16) are in fact pixels having received part of the energy of an X-ray event. These events will disappear from the raw spectrum and end up in the broadened double or triple + quadruple energy peak. Furthermore, the simple removal of multiple (≥ 4) hits due to charged particles etc., which are also mostly located between the noise and the energy peak, will finally result in a very clean energy spectrum of which some examples are presented in fig. 5 of the preceding article [1]. This procedure has been tested with different X-ray sources at several energies between 1.9 and 6.5 keV and gives excellent results.

8. Conclusions

The field of low-energy X-ray detection benefits greatly from CCDs which are the detectors of the present and future. In particular, let us mention the intrinsic position resolution of 22 μm , which is outstanding. In addition, if the ultimate position resolution is not needed, binning of lines and columns can reduce readout time. Furthermore, the energy resolution (< 180 eV FWHM) competes effectively with Si(Li) detectors of similar or smaller sizes and CCDs have a good detection efficiency ($\approx 50\%$, depending on the energy) which will be further improved with the new "fully depleted" CCDs now being available. Finally, CCDs do have extraordinary particle-discrimination and background-rejection capabilities.

Acknowledgements

We would like to thank E. Bovet and J.-P. Egger for stimulating discussions and support. This work was supported in part by the Swiss National Science Foundation.

References

- [1] For a general description see the preceding paper: G. Fiorucci et al., this issue, Nucl. Instr. and Meth. A292 (1990) 141.
- [2] CCD Imaging (EEV (English Electric Valve), Waterhouse Lane, Chelmsford, Essex, CM1 2QU, England) and references therein.
- [3] Kineric Systems Int. SA, Saconnex, CH-1218 Genève, Switzerland.

Letter to the Editor

A SIMPLE CHARGED-PARTICLE-DISCRIMINATING X-RAY DETECTOR

G. FIORUCCI and E. BOVET

Institut de Physique de l'Université, CH-2000 Neuchâtel, Switzerland

Received 21 March 1985

We describe a simple low energy X-ray detector capable of effectively discriminating between X-rays and charged particles.

The presence of an intense background is one of the major difficulties one has to face in performing an experiment requiring the detection of low energy X-rays at a low counting rate such as the measurement of the 2.5 keV 2P-1S transition in pionic hydrogen (π^-H) with a crystal spectrometer [1]. In such an arrangement a large fraction of the background occurring in the position-sensitive gas proportional counter can be absorbed in the physical shielding consisting of iron-loaded concrete, borated paraffin and lead, but a remaining fraction of the background, consisting mostly of Compton scattered electrons originating in the aluminium walls of the detector from degraded neutrons and gammas, is still present at a rate higher than the signal counting rate of about 0.3 c/min.

One method to discriminate between these (charged particle) background events and X-ray events would be to use a pulse shape discrimination technique since the

rise time is different for these two types of events (see fig. 1): the anode pulse for charged particles has a slower rise time since it is composed of charges created along the trajectory of the particle, arriving at different times at the anode. In an X-ray interaction, being essentially punctual at these energies (photoeffect), all the charges have the same drift time toward the wire, therefore producing a much steeper rise time of the pulse.

Such a method, however, fails to work around 2.5 keV since in this case the tracks have lengths of about 2 cm in the argon-methane gas mixture corresponding to charged particle trajectories very close to the walls. The drift times of the ionization charges are therefore very similar and the resulting pulse does no longer differ from an X-ray punctual event.

In this Letter we describe an alternative way to discriminate between charged particles and X-ray events.

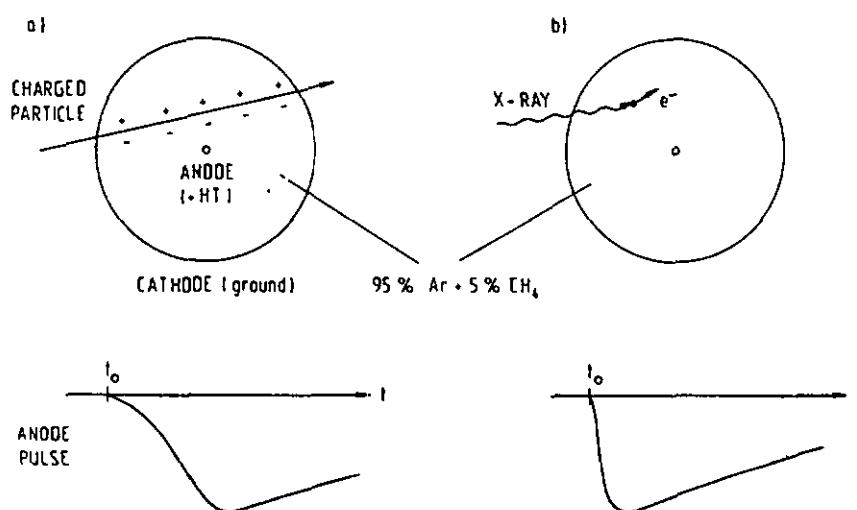


Fig. 1. Differences in the ionizing process and resulting anode pulse shape for (a) a minimum ionizing charge particle and (b) a low energy X-ray in a cylindrical gas proportional counter. The typical diameter of the detector is 40 mm corresponding to about 80% detection efficiency at $E_x = 2.5$ keV.

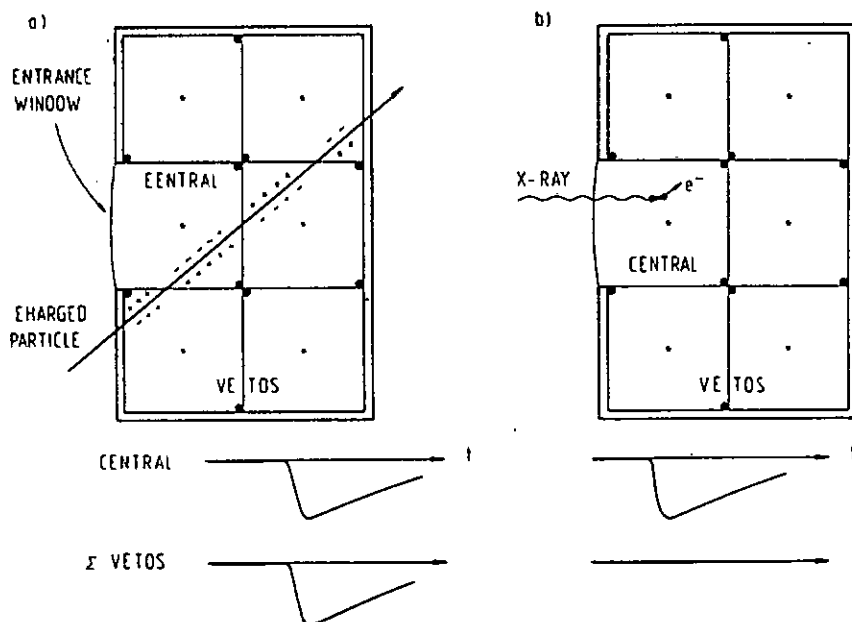


Fig. 2. Principle of operation of the anticoincidence detector triggered by (a) a charged particle and (b) a low energy X-ray.

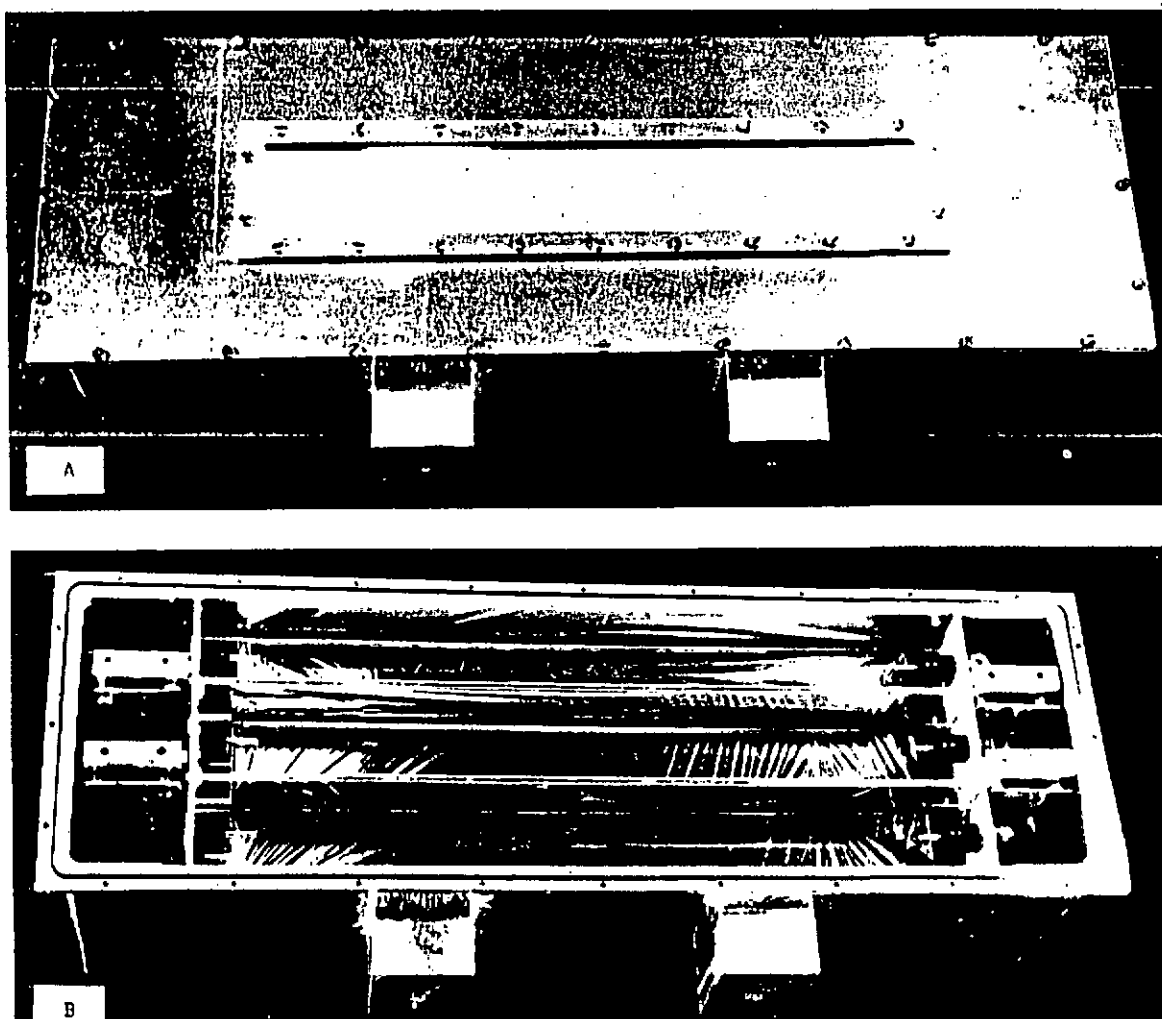


Fig. 3. Pictures of the real detector. (a) Front view of the X-ray detector with the thin polycarbonate entrance window. (b) Inner parts of the detector: the picture shows the central detector together with two of the five anticoincidence veto counters: the preamps can be seen on both sides.

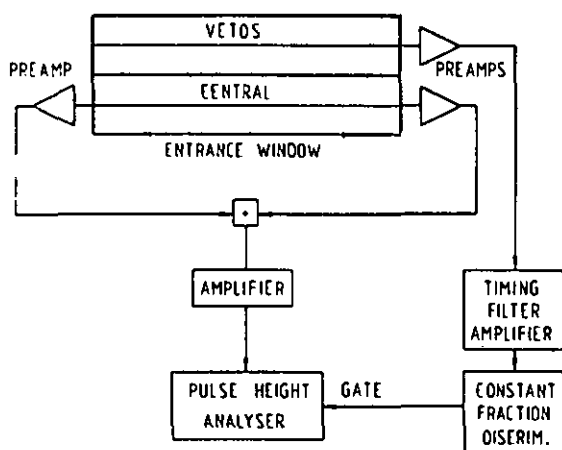


Fig. 4. Block diagram of the discriminating circuit.

The idea consists in having as thin walls as possible and surrounding the X-ray detector on top, bottom and behind by five anticoincidence gas proportional counters (see fig. 2). A picture of the real detector is shown in fig. 3. Each cell (40 mm $\times$ 40 mm) is separated by a thin 2 μ m aluminized polycarbonate wall and supported by four aluminium rods (2 mm diameter) at each corner. The overall structure, including the preamplifiers, is housed in a tight aluminium container with a thin X-ray entrance window. For the sake of simplicity the five anticoincidence counters are all connected to

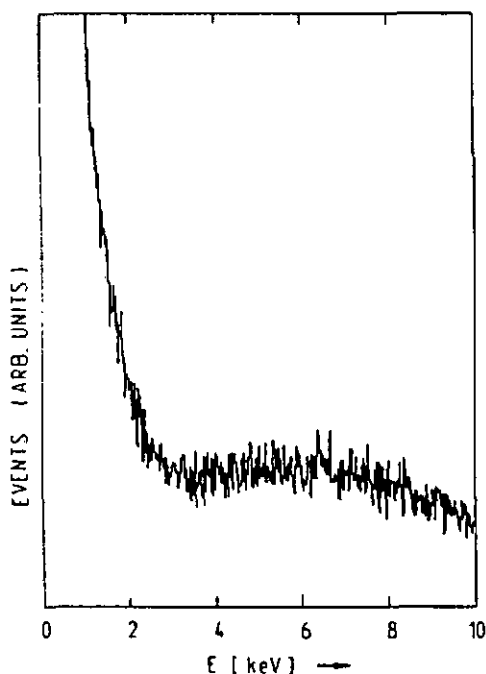


Fig. 5. Energy spectrum of the central detector corresponding to ambient background.

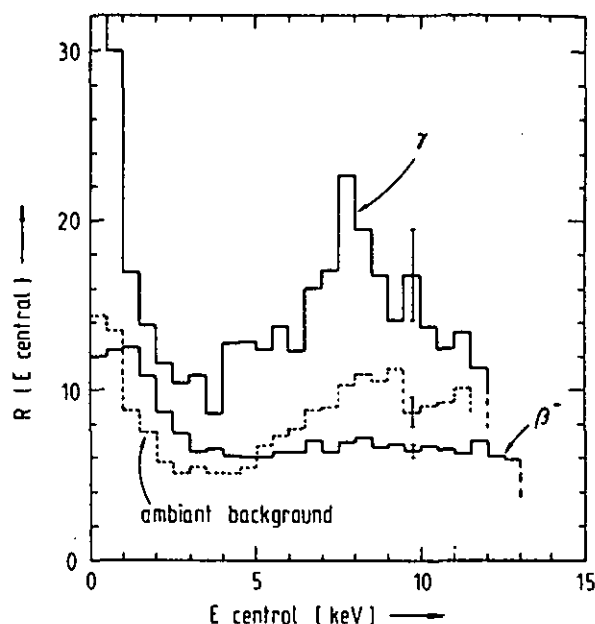


Fig. 6. Rejection factor $R(E)$ for the anticoincidence detector.

one single preamplifier. A mixture of 95% Ar + 5% methane is flowing continuously through the detector.

The block diagram of the discriminating circuit is shown in fig. 4. The threshold of the constant fraction discriminator was set as low as possible without triggering in the noise of the veto units.

The rejection capability of this anticoincidence detector has been investigated under various types of background by irradiating the detector with β^- (^{90}Sr), γ (^{22}Na), neutrons ($^6\text{Li}(p,n)^6\text{Be}$) and ambient background. The pulse height spectra of the central detector were very similar for the various types of irradiation. This is not surprising since all these different radiations eventually end up in producing Compton electrons in the walls of the detector (neutrons mostly interact via the $\text{Al}(n,\gamma)$ reaction). A typical spectrum is presented in fig. 5, showing a broad bump corresponding to minimum ionizing particles (Compton e^-) and a low energy tail. This tail is an artefact due to some cross-talk between the preamplifiers and corresponds to particles triggering the veto counters.

The resulting rejection factor $R(E)$ is shown in fig. 6 as a function of the deposited energy in the central detector. The overall behaviour of the spectrum can be interpreted as follows: the rejection factor has a maximum around 7–8 keV corresponding to minimum ionizing particles moving through the central detector along its diameter and therefore triggering one of the five veto cells; the large value for $R(E)$ at low energies is the consequence of the above mentioned fact that most of the small amplitude pulses in the central detector are produced by cross-talk between the preamplifiers. The

region of interest between 2 and 3 keV therefore corresponds to a local minimum but the rejection factor is still very good. This detector has recently been used in the focal plane of our graphite spectrometer to measure the π^- -H and π^- -D X-rays with a much improved signal to noise ratio [2].

This work was supported by the Swiss National Science Foundation.

References

- [1] E. Bover et al., *Nucl. Instr. and Meth.* **190** (1981) 613.
- [2] E. Bover et al., to be published in *Phys. Lett. B*.

P U B L I C A T I O N S

1. G.Fiorucci, J.-P.Bourquin, D.Bovet, E.Bovet, J.-P.Egger, C.Hêche, C.Nussbaum, D.Schenker, D.Varidel and J.-M.Vuilleumier:

CCDs AS LOW-ENERGY X-RAY DETECTORS, I. General description

Publié dans: Nucl. Instr. and Meth. A292(1990)141-146

2. D.Varidel, J.-P.Bourquin, D.Bovet, G.Fiorucci and D.Schenker:

CCDs AS LOW-ENERGY X-RAY DETECTORS, II. Technical aspects

Publié dans: Nucl. Instr. and Meth. A292(1990)147-155

3. G.Fiorucci and E.Bovet:

A SIMPLE CHARGED-PARTICLE-DISCRIMINATING X-RAY DETECTOR

Publié dans: Nucl. Instr. and Meth. A239(1985)635-638