



**HAL**  
open science

# Spectroscopie X d'ions très chargés et niveaux d'énergie de l'hydrogène pionique

Sophie Schlessler

► **To cite this version:**

Sophie Schlessler. Spectroscopie X d'ions très chargés et niveaux d'énergie de l'hydrogène pionique. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2009. Français. NNT: . tel-00507827v3

**HAL Id: tel-00507827**

**<https://theses.hal.science/tel-00507827v3>**

Submitted on 11 Jan 2011

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)

*et*

École Normale Supérieure

LABORATOIRE KASTLER BROSSEL

**Thèse de doctorat de l'Université Paris VI**

*présentée par*

Sophie SCHLESSER

**Spectroscopie X d'ions très chargés  
et  
niveaux d'énergie de l'hydrogène pionique**

*Soutenue le 12/06/09 devant le jury composé de :*

M. Jean-Paul DESCLAUX	Rapporteur
M. Paul INDELICATO	Directeur de thèse
M. Éric Olivier LE BIGOT	Co-Directeur de thèse
M. Bruno MANIL	Rapporteur
M. Alfred MAQUET	Président du jury
M. Philippe RONCIN	Examineur
Mme. Dominique VERNHET	Examinatrice



---

## Remerciements

---

Je remercie Paul pour m'avoir fait confiance, pour m'avoir accueillie dans son équipe au Laboratoire Kastler Brossel dans un cadre de travail si privilégié et enrichissant, aussi bien sur le plan scientifique qu'humain. C'est au sein de ce cadre que j'ai pu aborder de multiples champs de connaissances. Je le remercie pour avoir réussi à m'encadrer tout en m'ayant permis de travailler librement, ce qui n'est pas évident ;

Eric Olivier pour avoir co-dirigé ma thèse, pour le travail que nous avons produit ensemble, pour les connaissances qu'il m'a volontiers transmises, pour sa disponibilité et aussi pour ces trois années où nous avons partagé avec complicité le même bureau.

Je remercie les membres du jury : Jean-Paul Desclaux, Bruno Manil, Alfred Maquet, Philippe Roncin et Dominique Vernhet pour l'attention qu'ils ont porté à mon travail, leurs remarques et leurs conseils.

I thank Krzysztof Pachucki. I would like to tell him how much I have been glad to work with him. I thank him for coming in Paris, for all the knowledge he shared with me ;

Leopold Simons, Detlev Gotta for their help, for our exchanges, for welcoming me in PSI. I thank Daniel and Murat for their kindness, for making me discover Switzerland. I thank Albert, Thomas, Misha and all the people (that sometimes spend their night pushing the buttons) from the PSI experiment ;

Stéphane, le troisième locataire du bureau 217 pour sa bienveillance et sa sympathie ;

Martino et Dina, qui m'ont offert un accueil plein d'enthousiasme ;

Alex et Csilla pour n'avoir jamais hésité à m'aider quand j'en avais besoin ;

l'équipe de l'INSP avec laquelle nous partageons la source d'ions : Dominique Vernhet, Jean-Pierre Rozet, Emily Lamour, Christophe Prigent et Jacques Mérot, qui ont volontiers et avec sympathie apporté leur aide ;

Swann et Sergio pour leur aide précieuse sur le spectromètre.

Je tiens à remercier l'équipe de la mécanique avec laquelle j'ai eu un réel plaisir à travailler. Je remercie Pascal, Saysavanh, Frédéric pour leur travail impeccable. Je veux remercier tout particulièrement Jean-Michel et Alain que j'ai tant de fois sollicité à la fin de ma thèse. Enfin, je les remercie pour les bons moments que nous avons partagés ;

Jean-Pierre, Brigitte et Mohammed pour leur travail sur le spectromètre et pour leur disponibilité ;

Monique et Laetitia pour leur soutien, leur patience, et bien sûr leur contribution indispensable.

Je remercie tous les membres du laboratoire de faire que le quotidien y soit aussi agréable, et plus particulièrement pour leur aide : Serge Begon, François Biraben, Tristan Briant, Jean Hare, Antoine Heidmann, Francis Hulin-Hubard, Annick Métails, Chiara Molinelli, François Nez, Corinne Poisson, Jakob Reichel, José Romer, Alexandros Taverarakis.

Je remercie enfin chaleureusement tous ceux qui m'ont soutenue et accompagnée pendant ces années, ils sauront se reconnaître.



## Sommaire

Remerciements . . . . .	iii
Sommaire . . . . .	iv
Liste des figures . . . . .	x
Liste des tableaux . . . . .	xiv
INTRODUCTION . . . . .	1
PARTIE I SPECTROSCOPIE DES IONS TRÈS CHARGÉS . . . . .	7
<b>1. Analyse de spectres X d'ions très chargés obtenus avec un spectromètre à cristal courbe . . . . .</b>	<b>11</b>
<hr/>	
I Introduction . . . . .	11
II Exposition du principe de l'expérience . . . . .	14
II-1 Introduction à la spectroscopie de Bragg . . . . .	15
II-1-1 Diffraction des rayons X par un cristal : <i>loi de Bragg</i> . . . . .	15

<b>II-2</b>	<b>Cas d'un cristal sphérique : géométrie de Johann</b>	<b>16</b>
<b>II-2-1</b>	<b>Source ponctuelle, monochromatique</b>	<b>17</b>
II-2-1.a	<i>Comprendre le lieux de réflexions : restriction du problème à deux dimensions</i>	17
II-2-1.b	<i>Extension du problème à trois dimensions</i>	18
II-2-1.c	<i>Solution double</i>	19
<b>II-2-2</b>	<b>Extension du problème à une source étendue</b>	<b>20</b>
<b>II-2-3</b>	<b>Extension du problème à une source à spectre large</b>	<b>20</b>
<b>II-2-4</b>	<b>La forme des raies de transitions</b>	<b>21</b>
<b>III</b>	<b>Mise en œuvre expérimentale</b>	<b>22</b>
<b>III-1</b>	<b>Introduction</b>	<b>22</b>
<b>III-2</b>	<b>Matériel</b>	<b>23</b>
<b>III-2-1</b>	<b>Source</b>	<b>23</b>
<b>III-2-2</b>	<b>Cristaux</b>	<b>24</b>
III-2-2.a	<i>Mesure de l'angle de coupe</i>	25
III-2-2.b	<i>Orientation du cristal dans le spectromètre</i>	28
III-2-2.c	<i>Masques</i>	28
<b>III-2-3</b>	<b>Détecteur</b>	<b>29</b>
III-2-3.a	<i>Positionnement du détecteur</i>	29
III-2-3.b	<i>Capteurs CCD</i>	29
<b>III-3</b>	<b>Procédure pour obtenir des spectres</b>	<b>30</b>
<b>III-3-1</b>	<b>Balayage de la source</b>	<b>30</b>
<b>III-3-2</b>	<b>Recherche de la position de focale de la raie de référence</b>	<b>31</b>
<b>III-3-3</b>	<b>Acquisition</b>	<b>31</b>
<b>IV</b>	<b>Méthode d'analyse</b>	<b>31</b>
<b>IV-1</b>	<b>Introduction</b>	<b>31</b>
<b>IV-2</b>	<b>Résumé de la méthode d'analyse</b>	<b>32</b>
<b>IV-3</b>	<b>Les différentes étapes de l'analyse : présentation détaillée</b>	<b>34</b>
<b>IV-3-1</b>	<b>Extraction des données brutes : programme « CCDM »</b>	<b>34</b>
IV-3-1.a	<i>Projection 2D vers 1D</i>	34
<b>IV-3-2</b>	<b>Obtention des profils de raies simulés par méthode de Monte-Carlo : programme « xtrack »</b>	<b>35</b>
IV-3-2.a	<i>Fonction de réponse des cristaux : programme « Xop »</i>	35
IV-3-2.b	<i>Liste des paramètres à implémenter dans le programme de tracé de rayon</i>	36
<b>IV-3-3</b>	<b>Implémentation de la fonction de répartition de l'intensité de la source</b>	<b>37</b>
<b>IV-3-4</b>	<b>Ajustement de courbes</b>	<b>40</b>

<b>V</b>	<b>Résultats</b>	<b>45</b>
<b>V-1</b>	<b>Incertitudes</b>	<b>45</b>
V-1-1	Incertitude due à la répartition d'intensité de la source	45
V-1-2	Position du masque du cristal	45
V-1-3	Distance cristal-détecteur	45
V-1-4	Rayons de courbures des cristaux	46
V-1-5	Espace interréticulaire	46
V-1-6	Correction due à la courbure du cristal	46
<b>V-2</b>	<b>Résumé des résultats</b>	<b>47</b>
<b>V-3</b>	<b>Comparaison des résultats aux autres valeurs expérimentales et aux valeurs théoriques</b>	<b>57</b>
V-3-1	Graphiques	57
V-3-2	Discussion des résultats	69
V-3-2.a	Transitions héliumoides	69
V-3-2.b	Transitions lithiumoides	70
V-3-2.c	Transition bérylliumoïde	72
<b>V-4</b>	<b>Améliorations à apporter à l'analyse et perspectives</b>	<b>74</b>
V-4-1	Implémentation de l'intensité de la source	74
V-4-2	Remarques sur les fits : profils Lorentziens	74
V-4-3	Calcul de la correction due à la courbure des cristaux	75
<b>V-5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>75</b>
<b>2.</b>	<b>Conception d'un spectromètre X à deux cristaux plans</b>	<b>77</b>

<b>I</b>	<b>Introduction, objectifs scientifiques</b>	<b>77</b>
<b>II</b>	<b>Principe fondamental du spectromètre</b>	<b>78</b>
<b>II-1</b>	<b>Loi de Bragg</b>	<b>78</b>
<b>II-2</b>	<b>Association de deux cristaux</b>	<b>80</b>
II-2-1	Configuration <i>antiparallèle</i> des cristaux : mode dispersif	80
II-2-2	Configuration <i>parallèle</i> des cristaux : détermination de l'angle absolu formé par les cristaux	80
II-2-3	Avantages du spectromètre à deux cristaux plans	82
<b>III</b>	<b>Exploitation des données</b>	<b>82</b>
<b>III-1</b>	<b>Comment exploiter les données</b>	<b>82</b>

III-2	Enjeu de l'alignement . . . . .	83
IV	Caractéristiques techniques du spectromètre . . . . .	85
IV-1	Cristaux . . . . .	88
IV-1-1	La distance interréticulaire . . . . .	88
IV-1-2	Caractéristiques des cristaux . . . . .	88
IV-2	Alignement géométrique . . . . .	88
IV-2-1	Rotation de l'ensemble des axes . . . . .	88
IV-2-2	Parallélisme des axes entre eux . . . . .	90
IV-2-3	Position des cristaux par rapport aux axes . . . . .	90
IV-2-4	Position du spectromètre par rapport à la source . . . . .	91
IV-3	Contrôle du spectromètre . . . . .	93
IV-3-1	Asservissement en température . . . . .	93
IV-3-1.a	Résistances chauffantes . . . . .	93
IV-3-1.b	Sondes de température . . . . .	93
IV-3-1.c	Electronique . . . . .	93
IV-3-2	Détection . . . . .	93
IV-3-2.a	Effet des variations d'intensité de la source au cours de la prise de données . . . . .	94
IV-3-2.b	Effet du vide sur les éléments électroniques mis sous haute tension . . . . .	95
IV-3-3	Vide . . . . .	95
IV-3-3.a	Pompage . . . . .	95
IV-3-3.b	Isolation du spectromètre avec la source . . . . .	95
IV-3-4	Lecture des angles . . . . .	96
IV-4	Procédure d'alignement . . . . .	97
IV-4-1	Alignement des axes . . . . .	97
IV-4-2	Ajustement de l'inclinaison des supports de cristaux . . . . .	98
IV-4-3	Procédure pour positionner précisément la plaque . . . . .	98
IV-5	Acquisition des données . . . . .	99
V	Premiers résultats . . . . .	100

---

**PARTIE II THÉORIE 103**
**3. Corrections électromagnétiques aux niveaux d'énergies de l'hydrogène pionique 105**


---

<b>I</b>	<b>Introduction</b>	<b>105</b>
I-1	L'expérience	106
<b>II</b>	<b>Motivations théoriques en amont : interaction forte</b>	<b>107</b>
II-1	Présentation du domaine	107
II-2	L'hydrogène pionique : interaction électromagnétique et interaction forte	108
<b>III</b>	<b>Calculs</b>	<b>110</b>
III-1	Hamiltonien de l'interaction de Breit-Pauli	111
III-2	Polarisation du vide	114
III-2-1	Polarisation du vide au premier ordre, à une boucle	114
III-2-2	Polarisation du vide muonique	117
III-2-3	Correction relativiste à la polarisation du vide	117
III-2-4	Polarisation du vide au second ordre	119
III-2-5	Polarisation du vide double	120
III-3	Effets de taille finie des particules	120
III-3-1	Correction principale due à la taille finie des particules	120
III-3-1.a	<i>Définition du rayon des particules et terme de Darwin</i>	122
III-3-2	Effets de taille finie des particules et polarisation du vide	122
III-4	Self-énergie et échange de deux photons	124
III-4-1	Self-énergies	124
III-4-2	Echange de deux photons	125
III-5	Recul de l'atome	125
<b>IV</b>	<b>Résumé des résultats</b>	<b>127</b>
IV-1	Résumé des résultats sous forme de tableaux	127
IV-1-1	Incertitudes sur les énergies des niveaux	130
IV-1-1.a	<i>L'erreur pour chaque correction</i>	130
IV-1-1.b	<i>L'erreur sur la valeur totale (somme des contributions)</i>	131

IV-1-2	<b>Incertitude sur les énergies de transitions</b> . . . . .	131
IV-1-2.a	<i>L'erreur pour chaque correction</i> . . . . .	131
IV-1-2.b	<i>L'erreur sur la valeur totale (somme des contributions)</i> . . . . .	131
IV-2	<b>Comparaison des résultats aux précédentes valeurs utilisées</b> . . . . .	131
IV-3	<b>Conséquence sur la valeur du décalage en énergie dû à l'interaction forte</b> . . . . .	134
IV-4	<b>Perspectives</b> . . . . .	134
 <b>CONCLUSION</b>		<b>136</b>
 <b>APPENDICE</b>		<b>141</b>
 <b>A. Complément de calculs au chapitre 3</b>		<b>143</b>
<hr/>		
I	<b>Complément au § III-2-1</b> . . . . .	143
II	<b>Complément au § III-2-3</b> . . . . .	145
 <b>BIBLIOGRAPHIE</b>		<b>147</b>

## Table des figures

1.1	Niveaux d'énergie d'un ion à 2 électrons (héliumoïde) . . . . .	12
1.2	Niveaux d'énergie d'un ion à 3 électrons (lithiumoïde) . . . . .	12
1.3	Niveaux d'énergie d'un ion à 4 électrons (bérylliumoïde) . . . . .	12
1.4	Transitions présentes sur les spectres : exemple de l'argon . . . . .	13
1.5	Le spectromètre à cristal à courbure sphérique . . . . .	14
1.6	Loi de Bragg . . . . .	15
1.7	Courbure des cristaux . . . . .	16
1.8	Réflectivité des cristaux courbes . . . . .	17
1.9	Réflexion sur un cristal circulaire . . . . .	18
1.10	Solutions des lieux de réflexion sur un cristal circulaire . . . . .	18
1.11	Réflexion sur un cristal sphérique . . . . .	19
1.12	Position de la source correspondant à la solution double . . . . .	19
1.13	Construction d'une raie d'énergie E . . . . .	20
1.14	Construction d'une raie d'énergie E' . . . . .	21
1.15	Exemple d'image détectée . . . . .	22
1.16	Éléments constituant une source ECR . . . . .	24
1.17	Photographie d'un cristal et de son support . . . . .	25
1.18	Schéma d'un cristal . . . . .	26
1.19	Procédure de mesure de l'angle de coupe . . . . .	26
1.20	Figure de dispersion déterminant l'angle de coupe . . . . .	27
1.21	Mesure de l'angle de coupe : Détermination du point de rotation de la surface d'un cristal . . . . .	27
1.22	Schéma des axes de rotation du spectromètre . . . . .	28
1.23	Schéma des masques appliqués sur les cristaux . . . . .	29
1.24	Spectres obtenus lors d'une procédure de balayage de la source . . . . .	30
1.25	Simulation de l'élargissement des profils de raies autour de la position focale . . . . .	31
1.26	Principe de la méthode d'analyse . . . . .	32
1.27	La méthode d'analyse en pratique . . . . .	33
1.28	Impacts multiples sur les pixels . . . . .	35
1.29	Exemple de fonction de réponse du quartz(10-1) à 3.1 keV . . . . .	36
1.30	Reproduction de l'orientation des éléments du spectromètre pour un spectre . . . . .	37
1.31	Résultats obtenus avant l'introduction dans l'analyse de la répartition d'intensité de la source . . . . .	38
1.32	Illustration de l'effet de la répartition d'intensité dans la source sur la forme des raies . . . . .	39

TABLE DES FIGURES

1.33	Détermination de la répartition d'intensité dans la source . . . . .	40
1.34	Résultat de l'ajustement de courbes pour la raie de la transition $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ M1 de l'argon $16^+$ . . . . .	41
1.35	Résultat de l'ajustement de courbes pour les raies des transitions $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ , $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ et $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ de l'argon $16^+$ . . . . .	42
1.36	Résultat de l'ajustement de courbes pour la raie de la transition $1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$ de l'argon $14^+$ . . . . .	43
1.37	Résultat de l'ajustement de courbes pour les raies des transitions $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ et $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ de l'argon $15^+$ . . . . .	44
1.38	Résultat de l'ajustement de courbes pour les raies des transitions $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ et $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ du soufre $14^+$ , et deux raies de transitions non identifiées du soufre . . . . .	44
1.39	Modification de l'espace interréticulaire due à la courbure du cristal . . . . .	46
1.40	Résultats obtenus pour chaque spectre de la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ de l'argon $15^+$ . . . . .	47
1.41	Résultats obtenus pour chaque spectre de la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du soufre $13^+$ . . . . .	48
1.42	Résultats obtenus pour chaque spectre de la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du chlore $14^+$ . . . . .	48
1.43	Représentation graphique des résultats pour la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ de l'argon $15^+$ en fonction du cristal utilisé . . . . .	49
1.44	Représentation graphique des résultats pour la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du soufre $13^+$ en fonction du cristal utilisé . . . . .	50
1.45	Comparaison graphique du résultat pour la transition $1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow$ $1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$ de l'argon $14^+$ avec les valeurs théoriques et expérimentale . . . . .	58
1.46	Comparaison graphique du résultat pour la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ de l'argon $15^+$ avec les valeurs théoriques et expérimentales . . . . .	59
1.47	Comparaison graphique du résultat pour la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ de l'argon $15^+$ avec les valeurs théoriques et expérimentales . . . . .	60
1.48	Comparaisons graphiques du résultat pour la transition $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow$ $1s^2\ ^1S_0$ de l'argon $16^+$ avec les valeurs théoriques et expérimentales . . . . .	61
1.49	Comparaisons graphiques du résultat pour la transition $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow$ $1s^2\ ^1S_0$ de l'argon $16^+$ avec les valeurs théoriques et expérimentales . . . . .	62
1.50	Comparaisons graphiques du résultat pour la transition $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow$ $1s^2\ ^1S_0$ de l'argon $16^+$ avec les valeurs théoriques et expérimentales . . . . .	63
1.51	Comparaison graphique du résultat pour la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du soufre $13^+$ avec les valeurs théoriques . . . . .	64



1.52	Comparaison graphique du résultat pour la transition résultat pour la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du soufre $13^+$ avec les valeurs théoriques . . . . .	65
1.53	Comparaisons graphiques du résultat pour la transition $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ du soufre $14^+$ avec les valeurs théoriques et expérimentale . . . . .	66
1.54	Comparaisons graphiques du résultat pour la transition du résultat pour la transition $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ du soufre $14^+$ avec les valeurs théoriques et expérimentale . . . . .	67
1.55	Comparaison graphique du résultat pour la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du chlore $14^+$ avec les valeurs théoriques . . . . .	68
1.56	Comparaison graphique du résultat pour la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du chlore $14^+$ avec les valeurs théoriques . . . . .	69
1.57	Ecarts entre la théorie et nos résultats pour les transitions $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ et $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ en fonction de la charge nucléaire $Z$ . . . . .	71
1.58	Ecarts entre la théorie et nos résultats pour les écarts d'énergie entre les transitions $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ et $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ d'une part et les transitions $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ et $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ d'autre part en fonction de la charge nucléaire $Z$ . . . . .	71
2.1	Photographies de deux des premiers spectromètres à deux cristaux plans . . . . .	78
2.2	Loi de Bragg . . . . .	79
2.3	Réflexion de plusieurs longueurs d'ondes par un cristal. . . . .	79
2.5	Mesure du « zéro » de la position des cristaux : configuration parallèle du spectromètre à deux cristaux plans . . . . .	80
2.4	Principe du spectromètre à deux cristaux plans . . . . .	81
2.6	Mauvaise perpendicularité d'un cristal . . . . .	84
2.7	Photographie de l'enceinte du spectromètre avant le montage . . . . .	86
2.8	Photographie de l'intérieur de l'enceinte du spectromètre . . . . .	86
2.9	Schéma général du spectromètre à deux cristaux plans. . . . .	87
2.10	Photographie des roues coniques . . . . .	89
2.11	Photographie d'un des supports de cristal . . . . .	90
2.12	Photographie du système permettant d'incliner le cristal . . . . .	91
2.13	Illustration par simulation du mouvement d'inclinaison des supports de cristaux . . . . .	92
2.14	Photographie du système de translation du spectromètre . . . . .	92
2.15	Photographie des plaques de cuivre accueillant les résistances chauffantes . . . . .	94
2.16	Photographie du détecteur . . . . .	94
2.17	Décharge dans le câble haute tension du détecteur . . . . .	95
2.18	Variation de la taille des pas d'un des moteur . . . . .	96

TABLE DES FIGURES

---

2.19	Procédure pour positionner précisément la plaque dans la configuration de l'acquisition des données . . . . .	98
2.20	Moteur pas-à-pas en régime de repos . . . . .	99
2.21	Spectre obtenu en mode non dispersif . . . . .	101
2.22	Spectre obtenu en mode dispersif . . . . .	101
3.1	Spectre de transitions d'oxygène et d'hydrogène pionique obtenu au PSI . . . . .	106
3.2	Exemple d'insertion de paires {électron-positron} dans le propagateur photonique . . . . .	114
3.3	Approximation du propagateur photonique à l'ordre le plus bas . . . . .	115
3.4	Diagramme de polarisation du vide au premier ordre à une boucle . . . . .	116
3.5	Diagrammes de la correction relativiste à la polarisation du vide . . . . .	118
3.6	Diagrammes de polarisation du vide à deux boucles . . . . .	119
3.7	Diagrammes de la polarisation du vide double . . . . .	120
3.8	Diagrammes de correction de polarisation du vide à la correction de taille finie des particules . . . . .	123
3.9	Diagrammes de self-énergies du pion et du proton . . . . .	124

## Liste des tableaux

1.1	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ de l'argon $15^+$ . . . . .	49
1.2	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du soufre $13^+$ . . . . .	50
1.3	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du chlore $14^+$ . . . . .	51
1.4	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ de l'argon $15^+$ . . . . .	51
1.5	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du soufre $13^+$ . . . . .	52
1.6	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ du chlore $14^+$ . . . . .	52
1.7	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$ de l'argon $14^+$ . . . . .	53
1.8	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ de l'argon $16^+$ . . . . .	53
1.9	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ de l'argon $16^+$ . . . . .	54
1.10	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ de l'argon $16^+$ . . . . .	54
1.11	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ du soufre $14^+$ . . . . .	55
1.12	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ du soufre $14^+$ . . . . .	55
1.13	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition non identifiée #1 du soufre . . . . .	56
1.14	Résultats détaillés de l'analyse pour l'énergie de la transition non identifiée #2 du soufre . . . . .	56
1.15	Valeurs théoriques de la transition M1 $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ , raie de référence	57
1.16	Résultats pour les énergies des transitions étudiées . . . . .	57
1.17	Exemple des contributions aux énergies des transitions $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ et $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ de l'argon calculées par MCDF . . . . .	73
1.18	Exemple des contributions aux écarts en énergies entre des transitions bérylliumoïde et lithiumoïdes et la transition de référence héliumoïde M1 de l'argon calculées par MCDF . . . . .	73

3.1	Résumé des valeurs théoriques des contributions aux énergies des niveaux $3p_{1/2}$ , $3p_{3/2}$ , $4p_{1/2}$ et $4p_{3/2}$ de l'hydrogène pionique . . . . .	127
3.2	Résumé des valeurs théoriques des contributions aux énergies des niveaux $1s_{1/2}$ , $2p_{1/2}$ , et $2p_{3/2}$ de l'hydrogène pionique. . . . .	128
3.3	Résumé des valeurs théoriques des contributions aux énergies des transitions $2p_{1/2}$ , $2p_{3/2}$ , $3p_{1/2}$ , $3p_{3/2}$ , $4p_{1/2}$ , $4p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ de l'hydrogène pionique. Partie I . . . . .	129
3.4	Résumé des valeurs théoriques des contributions aux énergies des transitions $2p_{1/2}$ , $2p_{3/2}$ , $3p_{1/2}$ , $3p_{3/2}$ , $4p_{1/2}$ , $4p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ de l'hydrogène pionique.- Partie II . . . . .	130
3.5	Moyenne des transitions sur la répartition statistique des états de structures fines . . . . .	130



## INTRODUCTION



*Cadre scientifique*

Le sujet général de cette thèse concerne la physique des atomes, et en particulier l'interaction électromagnétique qui y tient une place prépondérante. Les particules qui constituent les atomes obéissent à des lois qui échappent *a priori* à l'intuition mais dont les manifestations sont omniprésentes. Pour les expliquer, il faut considérer que ces particules ont un comportement d'onde, comme cela fut postulé par de Broglie en 1923. Leur description fait appel aux notions de fonction d'onde et de probabilité de présence. Ainsi décrites, deux particules de charges opposées mises en présence peuvent occuper des états liés dont les niveaux d'énergie prennent des valeurs discrètes ; le système constitue alors un atome. Les atomes peuvent passer d'un état d'énergie à un autre en absorbant ou en émettant des photons d'énergie  $h\nu$ , proportionnelle à leur fréquence. L'énergie d'un photon émis lorsqu'un atome se désexcite d'un niveau d'énergie à un autre est fonction de la différence d'énergie entre les niveaux. Par conséquent, l'identification des énergies des photons émis par un atome permet de connaître les valeurs des énergies des états qu'il peut occuper. C'est en fait cette propriété, selon laquelle un système tel qu'un atome peut changer d'états en échangeant avec l'extérieur de l'énergie par quanta, qui est à l'origine de l'émergence de la physique quantique initiée par la théorie du corps noir de Planck [PLANCK 1900] et l'effet photoélectrique expliqué par Einstein [EINSTEIN 1905a]. Les atomes sont un admirable outil pour mettre à l'épreuve nos connaissances sur les particules constituant la matière, sur l'interaction électromagnétique, sur l'interaction forte ou encore sur l'interaction faible.

On ne sait pas calculer à l'heure actuelle les valeurs exactes des niveaux d'énergie des atomes, même pour le plus simple d'entre eux, l'atome d'hydrogène. Pour décrire les atomes, il faut associer la mécanique quantique et la relativité restreinte. En résolvant l'équation de Schrödinger (1926) [SCHRÖDINGER 1926b,a] pour l'hydrogène, on aboutit à des niveaux d'énergie dépendant du nombre quantique principale  $n$ , et du moment angulaire  $\ell$ , qui prennent tous deux des valeurs discrètes. On a alors tenté d'améliorer cette théorie en y introduisant le caractère relativiste des particules tel que le prévoit la théorie d'Einstein [EINSTEIN 1905b] exposée en 1905. En 1928, Dirac [DIRAC 1928a,b] aboutit à l'équation portant son nom qui décrit un électron, c'est-à-dire une particule de spin  $1/2$ , dans le champ d'un noyau. Sa théorie fait apparaître naturellement le spin de l'électron découvert quelques années auparavant par Uhlenbeck et Goudsmit [UHLENBECK and GOUDSMIT 1926] et expliqué par Pauli [PAULI 1925]<sup>1</sup> ; elle prévoit aussi l'existence de l'antiparticule de l'électron, le positron. L'équation équivalente décrivant une particule de spin nul dans le champ d'un noyau est l'équation de Klein-Gordon (1926) [KLEIN 1926 ; GORDON 1926 ; FOCK 1926] ; elle fut en réalité la première tentative d'introduction de la relativité dans le problème de l'atome d'hydrogène. A partir de ces équations émergent les effets de structure fine (couplage spin-orbite, couplage spin-spin, terme de Darwin, ...).

En 1947, Lamb et Retherford [LAMB and RETHERFORD 1947, 1950] découvrent grâce à une expérience de spectroscopie que les niveaux  $^2S_{1/2}$  et  $^2P_{1/2}$  de l'hydrogène ne sont pas dégénérés, contrairement à ce que prévoit l'équation de Dirac. En étudiant les spectres du sodium et du gallium (1948), Kusch et Foley [KUSCH and FOLEY 1948]

---

1. Notamment grâce à l'expérience de Stern et Gerlach [GERLACH and STERN 1922] et l'effet Zeeman anormal.



trouvent une valeur expérimentale du facteur de Landé de l'électron, qui intervient dans l'équation de Dirac, en léger désaccord avec la valeur théorique, ce qui avait été observé pour la première fois en 1947 [NAFE ET AL. 1947].

Ces résultats ajoutés aux questions fondamentales restées sans réponse posées par la combinaison de la relativité et de l'électromagnétisme, ont conduit les théoriciens, comme entre autres Feynman, Tomonaga, Schwinger et Dyson à créer de nouveaux concepts, formant ainsi l'électrodynamique quantique [TOMONAGA 1946 ; KOBAYASHI ET AL. 1947a,b ; KOBAYASHI and TOMONAGA 1948 ; TATI and TOMONAGA 1948 ; SCHWINGER 1948a,b ; DYSON 1949a,b ; SCHWINGER 1949a,b ; FEYNMAN 1949b,a ; DYSON 1952 ; SCHWINGER 1958]. Cette théorie est basée sur la possibilité de création ou annihilation de particules pour tout champ, dans la mesure où la charge totale est conservée. Les plus importantes corrections aux niveaux d'énergie d'un atome apportées par l'électrodynamique quantique sont la self-énergie et la polarisation du vide. Elles reproduisent remarquablement les valeurs expérimentales. Nous développerons ce sujet plus en détails dans l'introduction à la deuxième partie.

D'autre part, il a fallu être en mesure de prédire les niveaux d'énergie que peuvent occuper les atomes à plusieurs électrons pour lesquels il n'existe pas d'équation analytique équivalente à l'équation de Dirac. Pour cela, on a recours aux calculs numériques qui prennent en compte l'effet des interactions entre les électrons. Nous reviendrons sur ce point dans l'introduction à la première partie.

Nous n'avons ici évoqué que les points clefs constitutifs de la physique des atomes. Il existe de nombreux autres effets à prendre en compte en fonction du système que l'on étudie : les effets de tailles finies des particules telles que les protons, les effets de recul du noyau, ou encore les effets de l'interaction forte qui peuvent avoir lieu dans les atomes exotiques tels que l'hydrogène pionique que nous allons étudier dans la deuxième partie.

### *Plan de la thèse*

Le travail de cette thèse se situe donc dans ce cadre et avait pour but d'améliorer les connaissances sur certaines des théories précédemment évoquées que ce soit à partir de calculs théoriques ou d'observations expérimentales. Cette thèse se divise en trois chapitres. Le premier chapitre présente une nouvelle méthode d'analyse des données recueillies dans le cadre d'une expérience de spectroscopie dans le domaine des rayons X pour des ions très chargés à charge nucléaire moyenne (ions de soufre :  $Z = 16$ , de chlore :  $Z = 17$  et d'argon :  $Z = 18$ ). Celle-ci s'est déroulée à l'Institut Paul Scherrer en Suisse et avait essentiellement pour but l'observation de raies de transitions issues d'ions héliumoides (2 électrons), lithiumoides (3 électrons), bérylliumoides (4 électrons). Le dispositif expérimental est basé sur la diffraction par un cristal à courbure sphérique des rayons X émis par le plasma d'une source ECR. Le cristal disperse spatialement les rayons qui sont détectés par une caméra CCD. Le travail présenté dans ce chapitre a pour but de convertir les données acquises en valeurs pour les énergies des transitions ayant lieu au sein du plasma. On explique le principe du spectromètre, et comment la diffraction des rayons produit les spectres, ce qui permet de comprendre quels sont les paramètres clefs à prendre en compte dans l'analyse. En effet, notre méthode s'appuie sur un programme de simulation reproduisant l'expérience. Les énergies sont obtenues

par identification des profils de raies simulés aux spectres expérimentaux.

Le second chapitre concerne lui aussi la spectroscopie des ions très chargés à numéros atomiques moyens, c'est pourquoi celui-ci est associé au premier chapitre pour constituer la première partie de cette thèse. Il s'agit de présenter l'élaboration d'un spectromètre à deux cristaux plans et sa mise en place sur la source d'ions ECR SIMPA située au Laboratoire Kastler Brossel et acquise en commun avec l'Institut des NanoSciences de Paris (INSP). Ce spectromètre a l'avantage de mesurer les énergies des transitions de manière absolue. En effet, la valeur de l'énergie d'un rayon X réfléchi par les deux cristaux est simplement fonction de l'angle formé par ces derniers. Tous les efforts sont donc concentrés autour de la maîtrise des paramètres géométriques, que ce soit au niveau de l'élaboration mécanique, de l'acquisition des données, ou de l'analyse.

Le dernier et unique chapitre de la deuxième partie traite des calculs théoriques des contributions dues à l'interaction électromagnétique aux niveaux d'énergie de l'hydrogène pionique. Cet atome est constitué d'un proton et d'un pion, particule instable, composée de deux quarks, de spin nul et de masse et de taille comparable à celle du proton. C'est surtout un hadron, capable d'interagir avec le proton *via* l'interaction forte. On s'est particulièrement intéressé aux transitions  $2p \rightarrow 1s$ ,  $3p \rightarrow 1s$ ,  $4p \rightarrow 1s$ , qui ont été observées à l'Institut Paul Scherrer [GOTTA 2004] à l'aide du spectromètre à courbure sphérique évoqué précédemment. Ceci a pour but de déduire certains paramètres (les longueurs de diffusion hadroniques) entrant en jeu dans la théorie de l'interaction forte, que l'on peut calculer à partir des résultats expérimentaux et des calculs présentés dans ce chapitre. En effet, même si l'interaction électromagnétique est prédominante dans l'hydrogène pionique, les niveaux d'énergie sont également sensibles à l'interaction forte entre pion et proton. En soustrayant la contribution électromagnétique à l'énergie totale observée expérimentalement, on déduit la contribution due à l'interaction. En améliorant la précision de la valeur de la contribution électromagnétique à l'énergie (relativement à la précision de l'expérience), on améliore directement la précision sur les paramètres de l'interaction forte déduits. Les nouvelles valeurs des longueurs de diffusions pour les particules interagissant par la force forte permettront de faire progresser les connaissances théoriques dans ce domaine où les prévisions issues de différentes approches sont en désaccord ([SIGG ET AL. 1996], [LYUBOVITSKIJ and RUSETSKY 2000], [ERICSON ET AL. 2004], [GASSER ET AL. 2008]).



Première partie

SPECTROSCOPIE DES IONS TRÈS CHARGÉS



---

---

## Introduction à la première partie

---

Les ions très chargés à  $Z$  moyens ou grands présentent un intérêt particulier. La vitesse moyenne des électrons étant proportionnelle à la charge du noyau d'après le modèle de Bohr<sup>1</sup>,  $\frac{v}{c} \propto Z\alpha \simeq Z/137$ . Plus la charge du noyau est élevée, plus la physique de l'ion aura un caractère relativiste.

Pour prédire les niveaux d'énergie, il est nécessaire de modéliser l'ensemble du nuage électronique, d'utiliser une théorie capable de gérer les interactions entre les électrons qui engendrent des corrélations entre les différents états. Parmi les méthodes permettant de calculer les niveaux d'énergie de tels systèmes, on compte par exemple « Multi Configuration Dirac Fock General Matrix Element » (MCDFGME) [DESCLAUX ET AL. 1971 ; DESCLAUX 1975 ; GRANT ET AL. 1980 ; GORCEIX ET AL. 1987 ; INDELICATO ET AL. 1987 ; INDELICATO 1988 ; INDELICATO and DESCLAUX 1990 ; BOUCARD 1998], ou « Many Body Perturbation Theory » (MBPT) [KELLY 1963, 1964 ; JOHNSON and SOFF 1983 ; JOHNSON and SAPIRSTEIN 1986 ; JOHNSON ET AL. 1987 ; PLANTE ET AL. 1994 ; SAFRONOVA and SAFRONOVA 2004 ; LINDGREN ET AL. 2004], basées sur la méthode de Hartree-Fock.

Malgré le fait de prendre en compte les principales corrections liées à l'électrodynamique quantique (QED), et une partie des corrélations entre les électrons, certaines améliorations restent à apporter pour que les prédictions théoriques puissent être en accord avec les observations expérimentales devenues très précises (de l'ordre du meV), et ce plus particulièrement dans le cas des ions à plus de 2 électrons ayant au moins deux niveaux d'énergie non occupés dans les couches internes. Pour de tels ions, les calculs de la contribution aux niveaux d'énergie due à l'effet Auger<sup>2</sup> n'ont jamais été testés en détails, le calcul des interactions entre électrons reste encore à approfondir et certains calculs de QED comme la self-énergie écrantée [BLUNDELL 1993 ; YEROKHIN ET AL. 1999 ; INDELICATO and MOHR 2001 ; SAPIRSTEIN and CHENG 2006] ont été calculés au moyen d'approximations et doivent être testés. L'effet Auger par exemple correspond au fait que les ions peuvent éjecter des électrons (auto-ionisation) en se désexcitant si la transition libère suffisamment d'énergie. Cela a pour conséquence d'élargir et de déplacer les niveaux d'énergie. Cet effet est d'autant plus important que l'ion a d'électrons.

Dans le cas de notre étude, le fait de disposer de spectres expérimentaux issus de trois éléments permet de faire plus de comparaisons entre théorie et expérience. Etudier les spectres de ces ions permet d'évaluer l'importance des effets contribuant aux énergies théoriques qui restent à approfondir. A l'aide des résultats expérimentaux on

---

1. D'après le modèle de Bohr,  $v \approx \frac{Z}{n\hbar} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{Z\alpha c}{n}$  où  $n$  est le nombre quantique principal,  $\epsilon_0 \simeq 8,9 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{J}\cdot\text{m}$  est la permittivité du vide,  $e \simeq 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$  est la charge élémentaire,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  où  $h \simeq 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$  est la constante de Planck,  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c 4\pi\epsilon_0} \approx \frac{1}{137}$  la constante de structure fine,  $c \approx 3 \cdot 10^8$  la vitesse de la lumière dans le vide. Pour  $Z$  petit, les atomes ont un caractère faiblement relativiste.

2. Pour illustrer cet effet, considérons un ion dont la couche interne K est incomplète. Lorsqu'un électron d'une couche supérieure notée Y va transiter vers cet état, il libérera une énergie  $E_Y - E_K$  où  $E_Y$  est l'énergie de l'électron dans la couche Y et  $E_K$  l'énergie dans la couche K. Cette énergie peut être émise sous la forme d'un photon d'énergie  $E_Y - E_K$ , ou d'un électron provenant d'une couche supérieure notée Y', alors éjecté de l'ion avec une énergie cinétique  $E_c = (E_Y - E_K) + E_{Y'}$ .

---

aura la possibilité d'identifier les points sur lesquels les observations sont en désaccord avec les prévisions théoriques, ceci dans le but de les améliorer.

Il est néanmoins indispensable d'avoir une expérience dotée d'une précision suffisante pour que ces effets fins (de l'ordre de quelques meV) puissent être identifiables.

Outre l'intérêt purement théorique suscité par cette étude, il existe des domaines de recherche où l'obtention de valeurs étalons pour des transitions atomiques se révèle être directement utile, comme par exemple dans le cas des expériences impliquant des plasmas [PEACOCK ET AL. 2001] ou pour l'identification des transitions des spectres d'émission en astrophysique [CURDT ET AL. 2000 ; KALLMAN and PALMERI 2007] où l'argon et le soufre font partie des quinze éléments les plus importants.

## Chapitre 1

---

# Analyse de spectres X d'ions très chargés d'argon, soufre et chlore obtenus avec un spectromètre à cristal courbe

---

## I Introduction

---

Ce chapitre traite de l'analyse de données obtenues en Suisse à l'institut Paul Scherrer dans le cadre d'une expérience de spectroscopie X sur des ions d'argon, de soufre et de chlore très chargés. Les transitions en questions sont issues d'ions à 2, 3 ou 4 électrons.

A l'origine, le spectromètre avec lequel les mesures ont été réalisées était destiné à l'étude des atomes exotiques, comme par exemple l'hydrogène pionique sur lequel nous reviendrons au chapitre 3. Cette étude concerne notamment la mesure des largeurs des transitions ayant lieu dans de tels systèmes, qui nous renseigne sur la durée de vie des états. Pour extraire ces largeurs il faut connaître précisément la fonction de réponse du spectromètre. C'est entre autres dans ce but que l'on a choisit d'observer de façon complémentaire les spectres d'ions très chargés d'argon, de chlore et de soufre, car certaines de leurs transitions avaient l'avantage d'avoir à la fois la même énergie que les transitions que l'on cherchait à étudier dans l'hydrogène pionique et d'autre part des largeurs naturelles très petites. Ces transitions donnent lieu à des raies spectrales fournissant assez directement la fonction de réponse du spectromètre.

Dans ce chapitre, nous exposerons en premier lieu le principe de l'expérience, puis nous détaillerons le dispositif expérimental. Nous expliquerons ensuite la méthode d'analyse des données expérimentales et enfin nous présenterons les résultats obtenus.

Les figures 1.1, 1.2, 1.3 et 1.4 montrent les transitions que nous allons étudier.



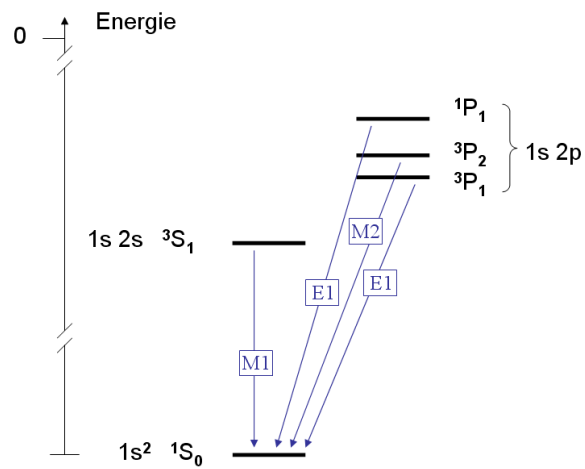


Fig. 1.1 – Niveaux d'énergie concernés par notre étude d'un ion à 2 électrons (héliumoïde).

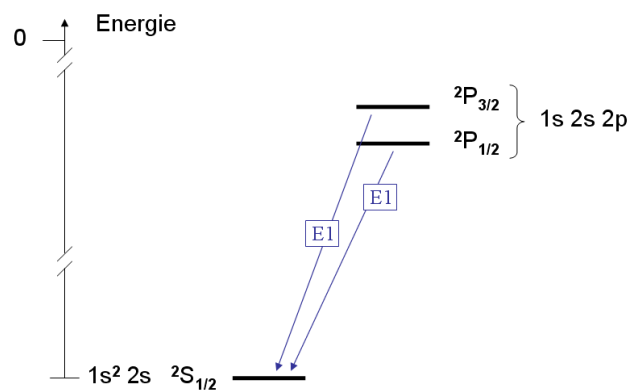


Fig. 1.2 – Niveaux d'énergie concernés par notre étude d'un ion à 3 électrons (lithiumoïde).

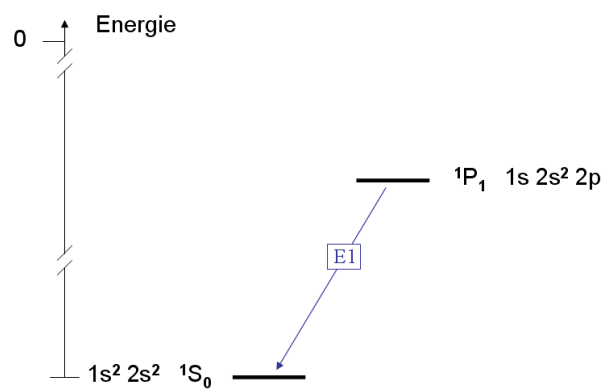
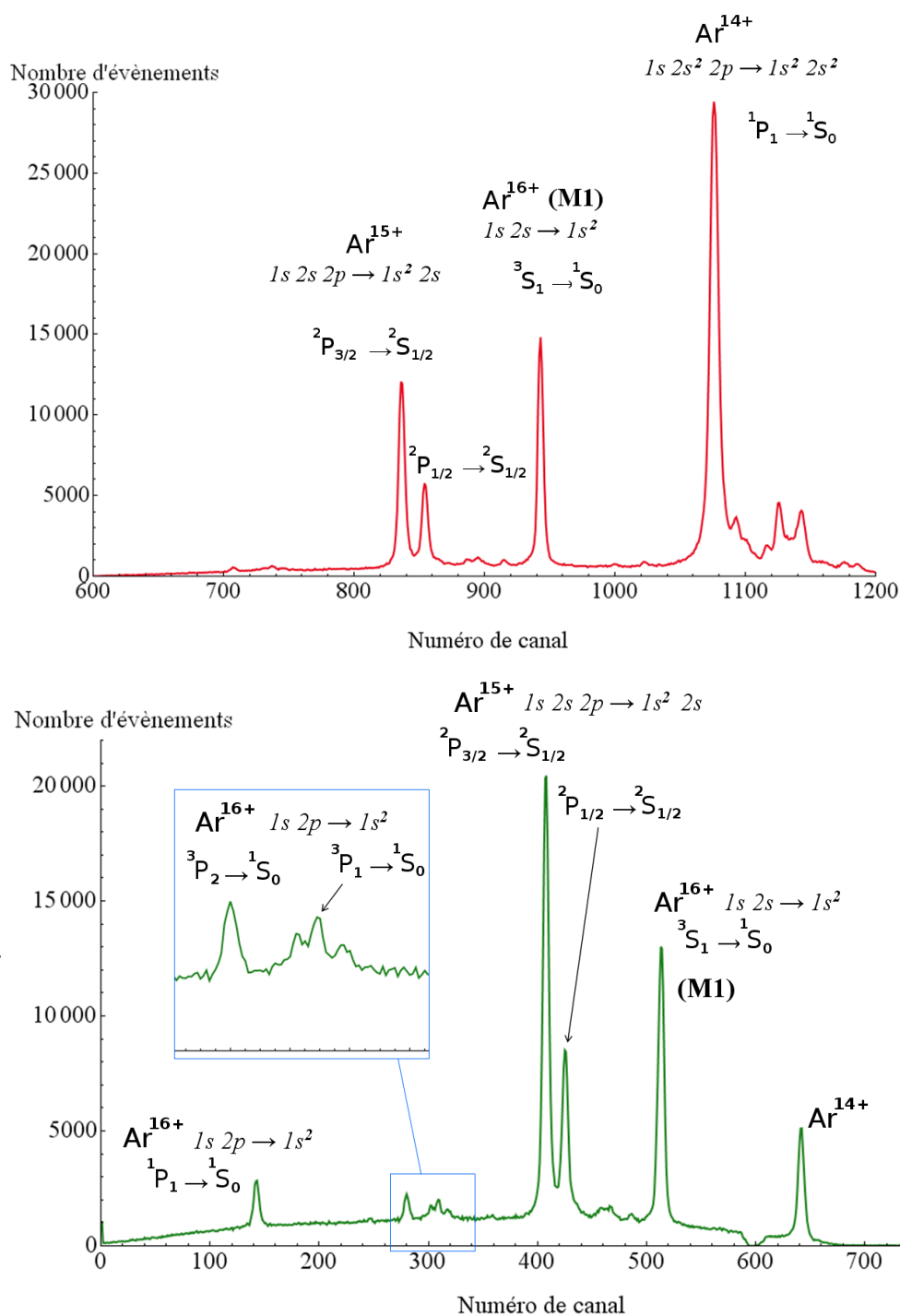


Fig. 1.3 – Niveaux d'énergie concernés par notre étude d'un ion à 4 électrons (bérylliumoïde).



**Fig. 1.4** – Transitions présentes sur les spectres : exemple de l’argon. Les autres éléments (soufre et chlore) présentent des spectres d’allures similaires. Les durées d’acquisition sont d’une heure pour le spectre du haut et deux heures pour le spectre du bas.

Les notations employées sont de la forme  $^{2S+1}L_J$ , où  $S$  est le spin total des électrons,  $L$  est le moment orbital total et est indiqué sous forme de lettres majuscules :  $S$  pour  $L = 0$ ,  $P$  pour  $L = 1$ ,  $D$  pour  $L = 2$ , etc ;  $J$  est le moment total ( $J = S + L$ ). Les notations  $E1$ ,  $E2$ ,  $M1$  et  $M2$  désignent quant à elles respectivement les types de transition dipolaires électriques, quadrupolaires électriques, dipolaires magnétiques et quadrupolaires magnétiques<sup>1</sup>.

## II Exposition du principe de l'expérience

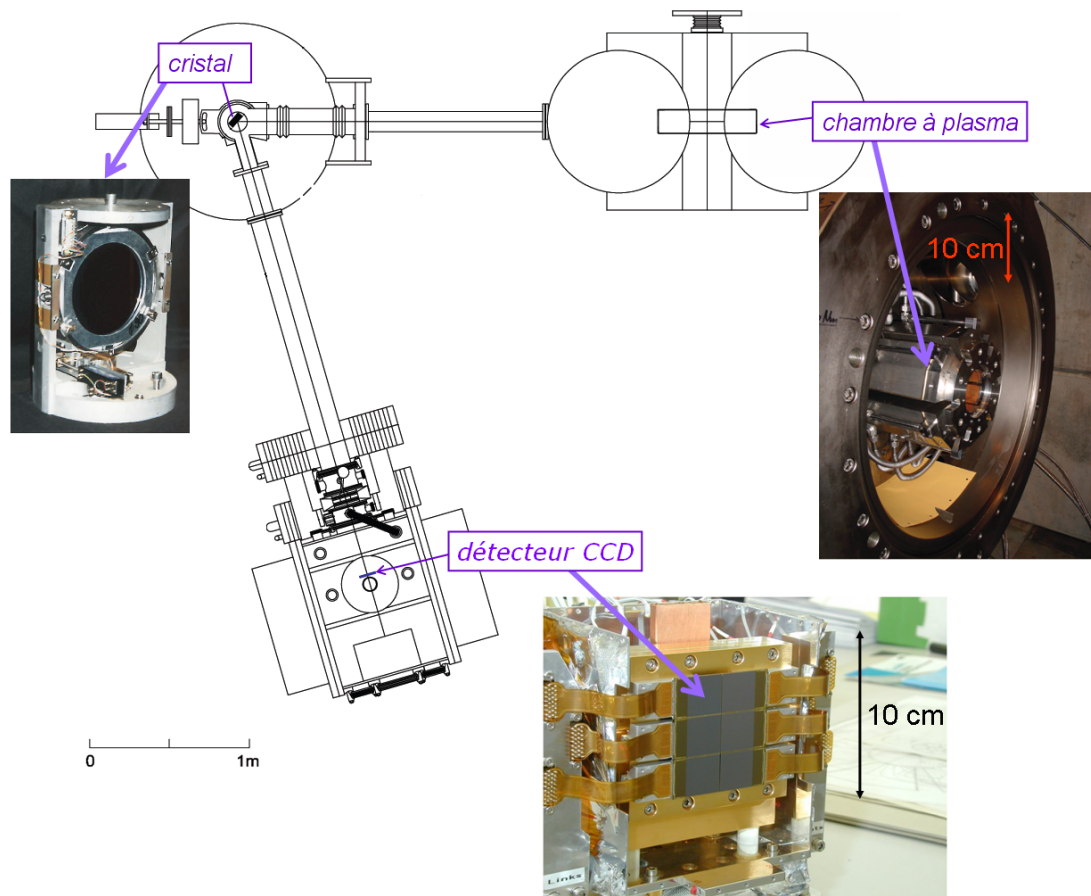


Fig. 1.5 – Schéma du spectromètre : vue de dessus. Les rayons X provenant de la source se réfléchissent sur le cristal puis sont collectés par le détecteur CCD.

Un plasma d'ions et d'électrons est produit grâce à une source ECRIT<sup>2</sup> dont on décrira le principe au paragraphe III-2-1. Les atomes ionisés changent de niveaux d'énergie

1. voir [COHEN-TANNOUJJI ET AL. 1977, § A<sub>XIII</sub> – 1] par exemple pour des détails.  
2. Electron Cyclotron Resonance Ion Trap

gie en absorbant ou en émettant des photons, notamment des rayons X. Une ouverture située à l'une des extrémités de la chambre plasma permet aux rayons d'être réfléchis par un cristal à courbure sphérique puis d'être collectés par un détecteur à capteurs CCD. On peut alors obtenir le spectre d'émission du plasma. Nous verrons à la section III les détails du fonctionnement du spectromètre. Nous allons d'abord voir dans la section suivante comment un tel dispositif permet d'identifier les énergies des transitions ayant lieu dans le plasma.

---

## II-1 Introduction à la spectroscopie de Bragg

### II-1-1 Diffraction des rayons X par un cristal : loi de Bragg

L'un des moyens les plus précis pour déterminer la longueur d'onde d'une transition atomique dans le domaine des rayons X est d'utiliser un cristal. En effet, un rayon X ne peut être réfléchi par un cristal que pour certains angles d'incidence qui sont fonctions de la longueur d'onde, et de la distance interréticulaire du cristal. La relation entre ces trois paramètres est appelée *loi de Bragg* [ASHCROFT and MERMIN 2002] :

$$n \frac{hc}{E} = n\lambda = 2d \sin \theta, \quad (1.1)$$

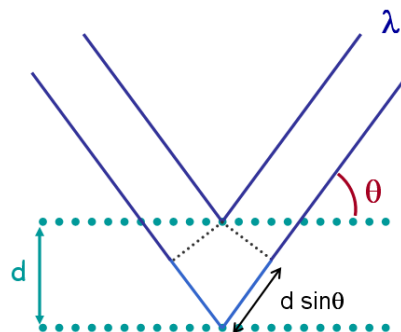


Fig. 1.6 – Différence de chemin optique entre deux parties de l'onde réfléchies par des plans consécutifs.

où  $n$  est un nombre entier positif,  $d$  est la distance interréticulaire,  $\lambda$  est la longueur d'onde,  $E$  son énergie et  $\theta$  est l'angle d'incidence de l'onde par rapport aux plans cristallins. Cette relation se déduit à l'aide de la figure 1.6. Soit une onde plane incidente de longueur d'onde  $\lambda$ , chaque plan cristallin réfléchit l'onde suivant un angle égal à l'angle d'incidence. Les interférences entre les parties de l'onde réfléchies par l'ensemble des plans cristallins sont toutes constructives si la différence de chemin optique  $2d \sin \theta$  entre deux plans consécutifs est un multiple de la longueur d'onde. Au premier ordre,  $n = 1$  et l'angle de Bragg noté  $\theta_B$  est donné par :  $\sin \theta_B = \frac{\lambda}{2d}$ . Au  $n$ -ième ordre  $\sin \theta_B^{(n)} = n \sin \theta_B$ .

Cette démonstration est simplifiée car elle ne tient pas compte du changement d'indice que subit l'onde lors de son passage du vide au cristal, qui change l'angle de propagation de l'onde et sa longueur d'onde au sein du cristal et modifie donc la condition sur les interférences. Un calcul complet<sup>1</sup> aboutit à la Loi de Bragg corrigée :

$$n\lambda \simeq 2d \sin \theta_B \left( 1 - \frac{1 - n_r}{\sin^2 \theta_B} \right), \quad (1.2)$$

où  $n_r$  est l'indice du milieu cristallin, et qui est supposé être proche de l'indice du vide ( $\approx 1$ ) pour les rayons X.

En réalité, la fonction de réponse d'un cristal à une onde incidente d'énergie donnée, n'est pas une fonction delta de Dirac comme la loi de Bragg l'affirme. La fonction de réponse réelle (voir IV-3-2.a) possède une certaine largeur (de l'ordre de quelques centaines de  $\mu\text{rad}$ ), dépendant de la structure des cristaux (du type et de l'agencement des atomes), des réflexions multiples (théorie dynamique de la diffraction) et des défauts naturels que possèdent les cristaux [DESLATTES and CHANTLER 1995].

## II-2 Cas d'un cristal sphérique : géométrie de Johann

Les cristaux que nous utilisons correspondent à une variante de la géométrie de Johann [JOHANN 1931]. Plus précisément, la géométrie de Johann correspond à des cristaux courbés selon une seule direction (avec un seul rayon de courbure), ils ont donc une courbure cylindrique. Dans notre cas, les cristaux sont courbés sphériquement (donc selon deux directions perpendiculaires, avec le même rayon de courbure) : voir la figure 1.7.

Pour pouvoir obtenir cette courbure, on taille des cristaux très peu épais (quelques dixièmes de mm). Nos cristaux sont de forme cylindrique dont la hauteur est suffisamment petite pour permettre à ceux-ci d'être courbés. Chaque cristal est taillé tel que les surfaces principales (disques) des cylindres soient parallèles aux plans cristallins.

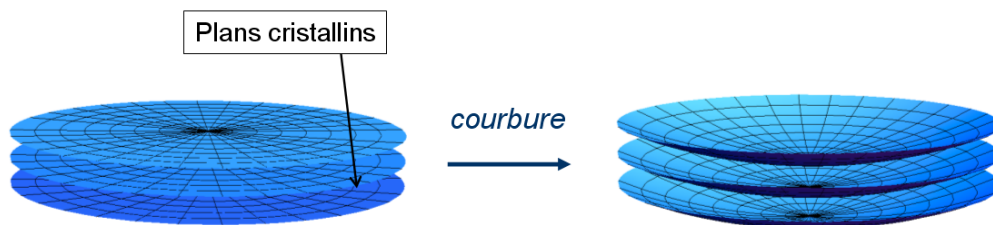
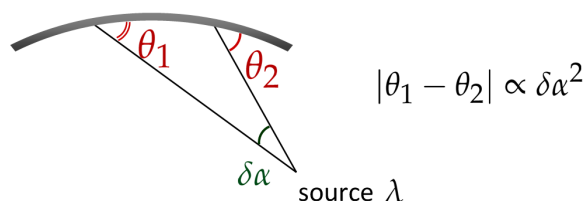


Fig. 1.7 – On impose aux cristaux une courbure sphérique.

1. Il faut résoudre le système d'équations :  $n\lambda/n_r = 2d \sin \theta'_B$ ;  $n_r \cos \theta'_B = \cos \theta_B$ , où  $\theta'_B$  est l'angle d'incidence de l'onde à l'intérieur du milieu cristallin.



**Fig. 1.8** – Pour simplifier, nous avons représenté le cristal courbé en vue de coupe, le long d'un plan contenant la source ponctuelle de rayons X de longueur d'onde  $\lambda$ . Grâce à la forme courbée du cristal, l'angle d'incidence d'un rayon issu d'une source ponctuelle varie comme le carré de la variation de direction du rayon  $\delta\alpha$ . Comme  $\delta\alpha$  est petit, la variation de l'angle d'incidence est très faible, et la condition de réflexion donnée par la fonction de réponse du cristal est vérifiée pour un large intervalle  $\delta\alpha$ . Dans le cas d'un cristal plan, la variation de l'angle d'incidence varie seulement comme la variation de la direction du rayon, ce qui autorise la réflexion sur un intervalle moindrecv.

Le rayon de courbure est très grand par rapport à l'échelle donnée par la structure cristalline, et l'on considère en première approximation, que localement, chaque réflexion sur le cristal se fait comme sur un cristal plan<sup>1</sup>.

Les cristaux courbes ont l'avantage de réfléchir plus de rayons que les cristaux plans ; voir la figure 1.8. C'est pourquoi l'on a choisit de les utiliser dans le cadre de notre expérience, qui avait à l'origine pour but l'observation des transitions dans les atomes exotiques. En effet, la source d'atome exotique est peu intense, et il faut pouvoir collecter un maximum d'événements. Nous allons aussi voir que de tels cristaux permettent de focaliser les rayons réfléchis. Il faut noter que l'emploi des cristaux courbes est délicat du fait qu'il faut pourvoir connaître leur rayon de courbure suffisamment précisément (nous reviendrons sur ce point au paragraphe V-1-4).

### II-2-1 Source ponctuelle, monochromatique

Considérons une source ponctuelle, monochromatique. Seuls les rayons possédant l'angle d'incidence donné par la loi de Bragg sont réfléchis. Dans notre cas, on utilise un cristal courbé selon une surface sphérique. Du fait de la géométrie du cristal, la réflexion est possible le long d'une portion de cercle (on néglige ici la largeur de la fonction de réponse du cristal). Cela peut se comprendre aisément en faisant le cheminement présenté dans les paragraphes suivants.

#### II-2-1.a Comprendre le lieux de réflexions : restriction du problème à deux dimensions

Considérons dans un premier temps le problème à deux dimensions, avec un cristal représenté par un cercle, la source étant fixée au point  $S(x_S, y_S)$  se situant à l'intérieur du cercle (voir la figure 1.9).

1. En réalité la déformation change la distance interréticulaire, mais l'on sait en principe calculer la correction sur les énergies due à cet effet, nous verrons au paragraphe V-1-6 comment l'inclure dans l'analyse.

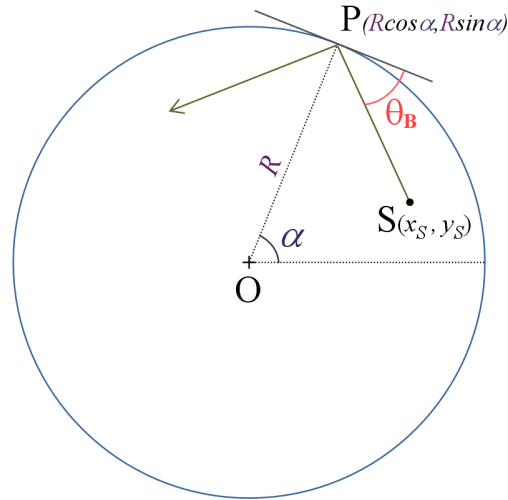


Fig. 1.9 – Restriction du problème à 2 dimensions : lieux de réflexions sur un cristal circulaire.

D'après la loi de Bragg, à une énergie fixée correspond un angle  $\theta_B$ . Les lieux  $P(R \cos \alpha, R \sin \alpha)$  de réflexions sur le cercle (le cristal) de rayon  $R$  sont tels que :

$$\sin \theta_B = \frac{\vec{PS} \cdot \vec{PO}}{\|PS\| \cdot \|PO\|} = \frac{R - x_S \cos \alpha - y_S \sin \alpha}{\sqrt{(x_S - R \cos \alpha)^2 + (y_S - R \sin \alpha)^2}} \quad (1.3)$$

Traçons la valeur de cet angle en fonction de  $\alpha$  :

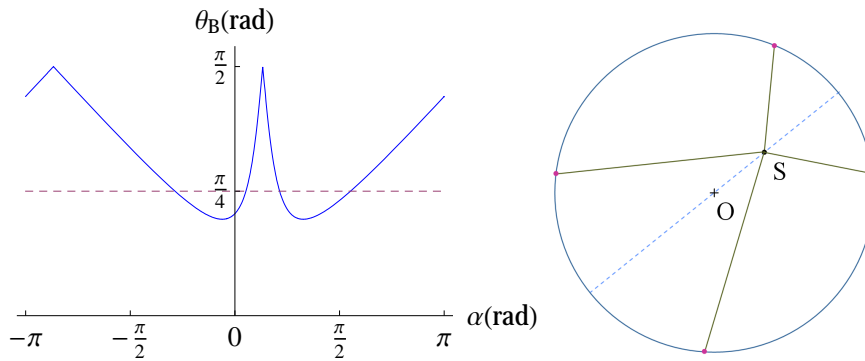


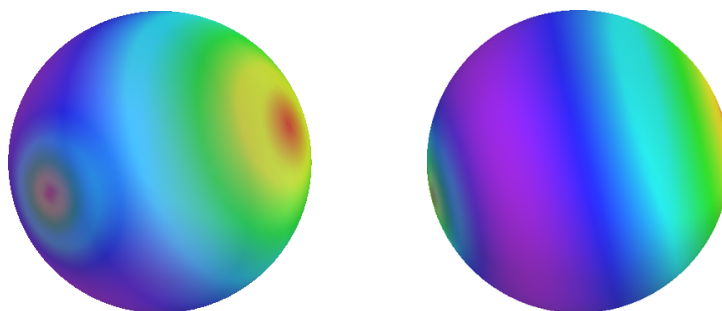
Fig. 1.10 – Exemple de solution des lieux de réflexion, dans le cadre du problème à 2 dimensions.

A chaque valeur de  $\theta_B$  correspondent quatre solutions (intersections de la courbe bleue et de la droite en pointillés sur la figure 1.10) pour l'angle  $\alpha$  quand la source est à l'intérieur du cercle ( $R^2 > x_S^2 + y_S^2$ ).

### II-2-1.b Extension du problème à trois dimensions

Pour étendre le raisonnement à trois dimensions, imaginons maintenant que le cristal soit une sphère. La droite contenant la source et le centre de la sphère est un axe

de symétrie. Par conséquent, en appliquant une rotation autour de cet axe aux lieux trouvés à l'aide du problème à deux dimensions, les lieux de réflexion sur la sphère sont deux cercles. Sur la figure 1.11, on a représenté l'angle d'impact d'un rayon provenant de la source sur la surface interne de la sphère à l'aide de couleur. Une couleur correspond à une valeur pour cet angle. Par exemple si la valeur de  $\theta_B$  correspond au vert, on voit qu'on atteint  $\theta_B$  pour deux lieux qui sont les cercles verts.

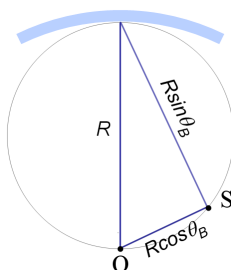


**Fig. 1.11** – Représentation suivant deux points de vues (pour plus de clarté) des solutions des lieux de réflexions pour un cristal sphérique. Pour une source fixe, les différentes nuances de couleurs correspondent aux différentes valeurs de l'angle de réflexion. Les couleurs sont transparentes, ce qui permet de voir également l'arrière plan.

### II-2-1.c Solution double

On remarque que les deux solutions au problème, autrement dit les deux cercles, peuvent se trouver confondus (cela correspond au cercle violet sur la figure 1.11, ou encore aux minima de la courbe 1.10 dans le problème à 2 dimensions). Ainsi, se placer dans cette situation particulière permet dans le cadre de notre expérience, où le cristal ne représente qu'une petite portion de la surface sphérique, de collecter un maximum de rayons.

Pour l'expérience, le spectromètre a donc été placé par rapport à la source à une distance adéquate tenant compte du fait que la gamme d'énergie étudiée était étendue (entre 2.5 et 3.5 KeV environ).



**Fig. 1.12** – Position de la source correspondant à la solution double.



### II-2-2 Extension du problème à une source étendue

Avec une source étendue (non ponctuelle), les courbes solutions pour les points de réflexions décrites précédemment (portions de cercle) sont alors multiples, et couvrent d'ailleurs dans notre cas la totalité du cristal : la source peut être vue comme un ensemble de sources ponctuelles. Grâce à sa géométrie courbée, le cristal focalise les rayons qu'il réfléchit. Voyons où placer le détecteur afin d'obtenir une image nette, c'est-à-dire une image où les rayons sont focalisés. Pour commencer, trouvons les lieux où se croisent les rayons réfléchis, la source étant placée à la position décrite dans le paragraphe précédent (voir la figure 1.13). On peut tracer quelques rayons réfléchis avec l'angle  $\theta_B$  à différents niveaux de la surface du cristal en opérant une simple rotation autour du centre du cristal. Les lieux de croisements des rayons constituent ici à deux dimensions une caustique en forme de cercle (en pointillés sur la figure 1.13) de rayon égal à  $OF = R \cos \theta_B = OS$ . Les triangles  $OCS$  et  $OCF$  sont inscrits dans un cercle de rayon  $R/2$ , appelé *cercle de Rowland* (en trait continu sur la figure 1.13). Lorsque l'on met le détecteur en  $F$ , on coupe la trajectoire des rayons réfléchis par les différentes parties du cristal là où ils convergent ; nous désignerons cette position par l'expression « position de focalisation ».

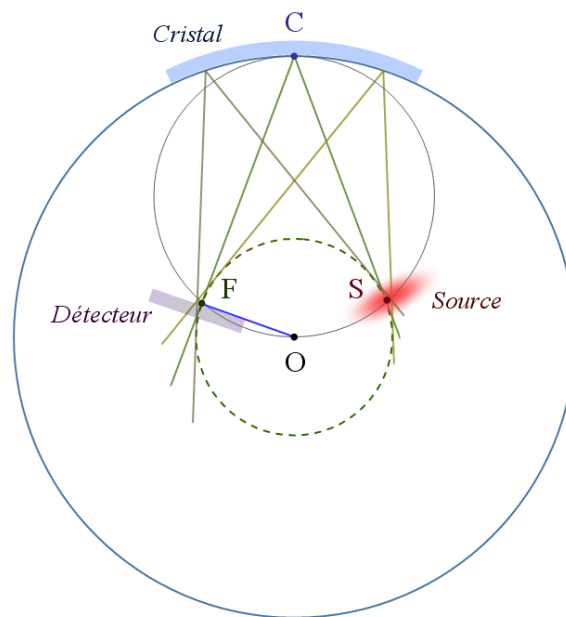


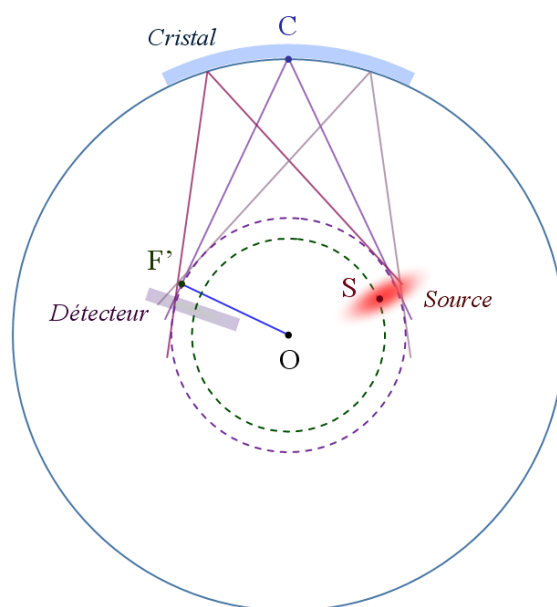
Fig. 1.13 – Agencement dans l'espace des rayons constitutifs d'une raie d'énergie E.

### II-2-3 Extension du problème à une source à spectre large

Pour finir de comprendre comment l'image que l'on obtient expérimentalement se construit, étendons le raisonnement au cas d'une source qui émet plusieurs longueurs d'onde différentes (voir la figure 1.14). Soit une autre énergie : l'angle de réflexion est légèrement différent, et la caustique forme un cercle de rayon différent. Se forme donc

sur le détecteur (qui est plan et dont la position est fixe lors d'une prise de données) une raie décalée par rapport à la précédente, et qui n'apparaîtra pas aussi bien focalisée que cette dernière.

Le cristal à courbure sphérique a donc l'intérêt de focaliser les rayons dans des directions qui dépendent de leurs énergies.



**Fig. 1.14** – Agencement dans l'espace des rayons constitutifs d'une raie d'énergie  $E'$ , raie quelconque.

### II-2-4 La forme des raies de transitions

En observant la figure 1.13 ou 1.14 au niveau du détecteur, on remarque que le lieu de croisement des rayons réfléchis (autour du point F) pour une énergie donnée n'est pas ponctuel, ce qui est désigné par l'*aberration de Johann*<sup>1</sup>. Le lieu des impacts des rayons couvre donc une certaine largeur sur le détecteur. D'autre part, la source émet des rayons X provenant de transitions atomiques ayant une largeur naturelle due entre autres à la durée de vie finie des niveaux excités. La forme (notamment la largeur) des raies observées sur le détecteur résulte de la convolution de ces largeurs naturelles par la fonction de réponse de l'instrument qui est liée au cristal, à la géométrie du spectromètre, de la source d'ions et du détecteur.

La forme et la position d'une raie spectrale ne dépend pas seulement de la largeur Lorentzienne et de l'énergie de la transition atomique qui en est à l'origine, elle dépend aussi de la fonction de réponse du spectromètre, dont on ignore l'expression théorique.

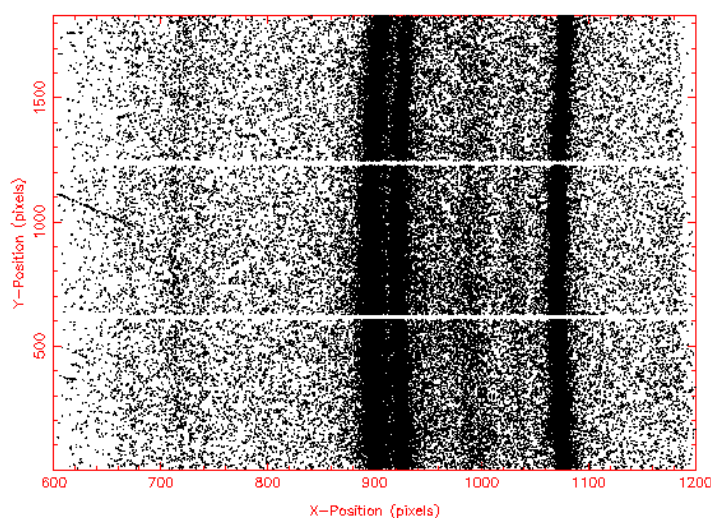
Le but de l'analyse est de déterminer à partir des images obtenues sur le détecteur les énergies et les largeurs des transitions atomiques correspondant à chaque raie ob-

---

1. Il existe une autre géométrie appelée *géométrie de Johann-Johansson* où les plans cristallins ne sont pas parallèles à la surface optique du cristal et qui permet d'avoir un lieu de croisement ponctuel.

servée; précisons que dans l'étude présentée dans ce chapitre, nous nous limitons à déterminer uniquement les énergies. La figure 1.15 montre un exemple d'image détectée.

Or, on est incapable à ce stade de relier la « position » d'une raie à son énergie, ou encore de définir une telle position. On va donc utiliser une simulation numérique, qui tentera de reproduire le plus fidèlement possible la réalité de l'expérience. Nous allons à présent voir en détail le dispositif expérimental que nous aurons à reproduire.



**Fig. 1.15** – Exemple d'image détectée : points d'impacts des rayons sur le détecteur. Les bandes noires correspondent à des raies de transitions.

---

## III Mise en œuvre expérimentale

---

### III-1 Introduction

Cette section aborde l'aspect technique de l'expérience, en se limitant au points clés entrant en jeu au niveau de l'analyse des données. Nous allons d'abord brièvement décrire le dispositif matériel qui a permis de mettre en œuvre le principe expérimental expliqué dans la section précédente. Il s'agit principalement de la source émettant les rayons X, du cristal, du détecteur, ainsi que de l'ensemble permettant de contrôler leur position. Ensuite, nous expliqueront les principales étapes de la procédure d'acquisition des spectres.

## III-2 Matériel

### III-2-1 Source

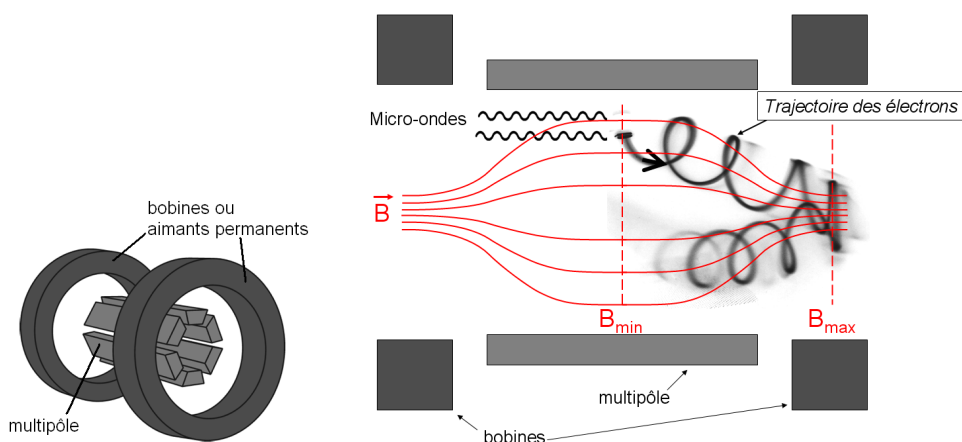
Les ECRIT ou ECRIS (Electron Cyclotron Resonance Ion Trap ou Source) comptent parmi les systèmes permettant d'obtenir des ions très chargés. Ils produisent un champ magnétique permettant de confiner le plasma constitué d'ions de divers états de charge et d'électrons. Des bobines magnétiques permettent le confinement axial et un multipôle (en général un hexapôle) situé entre ces bobines permet le confinement radial des particules. Sur la figure 1.16, sont représentées quelques lignes de champ magnétique. Le plasma est obtenu grâce à l'ionisation des atomes d'un gaz neutre d'argon, de soufre (dioxyde de soufre  $SO_2$ ) ou de chlore (fréon  $CH_2ClF$ ) par collision avec des électrons dotés d'une énergie cinétique suffisante.

Pour obtenir le plasma à partir du gaz neutre, des micro-ondes sont injectées dans la chambre contenant le gaz, ce qui arrache des électrons aux parois métalliques et permet d'enclencher le processus d'ionisation des atomes. Les électrons suivent une trajectoire hélicoïdale autour des lignes de champ. Le champ électrique oscillant des micro-ondes accélère les électrons perpendiculairement à la direction de propagation des ondes (et du champ magnétique  $\vec{B}$ ), car leur fréquence est choisie de sorte à être en résonance avec la fréquence cyclotron  $\omega_c = \frac{eB}{m_e}$  des électrons, où  $B$  est une des valeurs prises par le champ magnétique. La valeur du champ est constante le long d'une surface de forme ellipsoïdale ; c'est aux points appartenant à cette surface que les électrons sont accélérés par les micro-ondes. Décomposons la vitesse d'une particule à un instant donné :  $\vec{v} = \vec{v}_z + \vec{v}$ . La vitesse  $v_z$  est la vitesse le long de l'axe de la source (et du champ  $\vec{B}$ ). La composante de la vitesse  $\vec{v}$  est reliée à la valeur du champ magnétique  $B$  par la relation  $m\vec{v}^2/r = F_B = q\tilde{v}B$  où  $r$  est le rayon transverse de la trajectoire,  $q$  la charge de la particule et  $F_B$  la force centrifuge. Aussi, le moment magnétique de la particule est donné par  $\mathcal{M} = \frac{q}{2}\tilde{v}r$ . On a donc :

$$\mathcal{M} = q \frac{m\tilde{v}^2}{2B} . \quad (1.4)$$

Au cours de son déplacement, la particule subit les variations du champ magnétique le long de l'axe de la source. Si celui-ci s'accroît par exemple à l'approche de la zone où  $B = B_{max}$ , la vitesse  $\tilde{v}$  de la particule s'accroît d'après la conservation de  $\mathcal{M}$  (1.4) (en effet,  $\frac{d\mathcal{M}}{dt} = \frac{q}{2m}\vec{r} \times \vec{F}_B = 0$ ). Etant donné la conservation de l'énergie, la vitesse  $\vec{v}_z$  diminue, et atteint 0 lorsque  $B = q\frac{E}{\mathcal{M}}$  où  $E$  est l'énergie cinétique totale ; la particule change de direction, c'est-à-dire qu'elle est réfléchi (voir la figure 1.16). Elle reste donc confinée entre les deux bobines.

Les ions très chargés quant à eux sont regroupés au centre du plasma, à l'intérieur de la surface où les électrons sont accélérés. Ils restent confinés par le potentiel électrostatique créé par la charge espace que forme le nuage d'électrons. Leur énergie cinétique moyenne, qui dépend de ce potentiel, est de l'ordre de l'eV. Ce mouvement implique un élargissement Doppler relativement faible sur les transition, qui pour une transition de 3 keV est de l'ordre de 40 meV [SADEGHI ET AL. 2004 ; TRASSINELLI 2005].



**Fig. 1.16** – A gauche : représentation de l'ensemble permettant de créer les lignes de champ magnétique constitué du multipôle assurant le confinement radial (dans notre cas, un hexapôle) et de bobines ou d'aimants permanents responsable du confinement axial. A droite : représentation de la trajectoire suivie par les électrons accélérés par les micro-ondes autour des lignes de champ.

Pendant l'expérience, l'intensité du courant parcourant les bobines supraconductrices et la fréquence des micro-ondes sont restées constantes. En revanche, la puissance des micro-ondes a été ajustée à de nombreuses reprises pour optimiser l'intensité de l'émission des transitions qui nous intéressaient. Nous verrons au paragraphe IV-3-3, que la forme de la distribution d'intensité dans la source entre en jeu dans l'analyse.

Enfin, on peut appliquer différents collimateurs ayant une forme de fente horizontale<sup>1</sup> (1 mm × 28 mm, 4 mm × 28 mm ou 7 mm × 28 mm) à la sortie de la source destinés à diminuer le bruit de fond.

### III-2-2 Cristaux

Les cristaux sont en quartz ou en silicium, ils ont une forme de cylindre de 100 mm de diamètre et de 0,19 à 0,29 mm d'épaisseur. Leur finesse permet de les courber, afin qu'ils puissent épouser la face concave du support en verre (voir la figure 1.17) sur lequel ils sont fixés simplement par adhésion moléculaire. Le support en verre a été poli pour acquérir une forme de lentille divergente d'environ 25 mm d'épaisseur, dont la face concave a un rayon de courbure d'environ 3 m. Ces cristaux ont subi plusieurs mesures afin de caractériser leurs rayons de courbure le plus précisément possible : les incertitudes sont de l'ordre de quelques millimètres. Le double de l'espace interréticulaire (ou  $2d$ ) dans le vide à 22,5°C vaut pour le silicium 111 :  $0,62712016 \pm 0,00000001$  nm [GOTTA ET AL. 1999, Ref.109], pour le Quartz 10-1 :  $0,668719 \pm 0,000027$  nm, pour le quartz 100 :  $0,85110 \pm 0,00004$  nm ; ces deux dernières valeurs ont été calculées à partir des résultats non publiés de E. Förster communiqués par D. Gotta. La température des cristaux est suffisamment stable pour être relevée au début de chaque spectre avec une précision de 0,1 °.

1. Le plan de réflexion est horizontal.

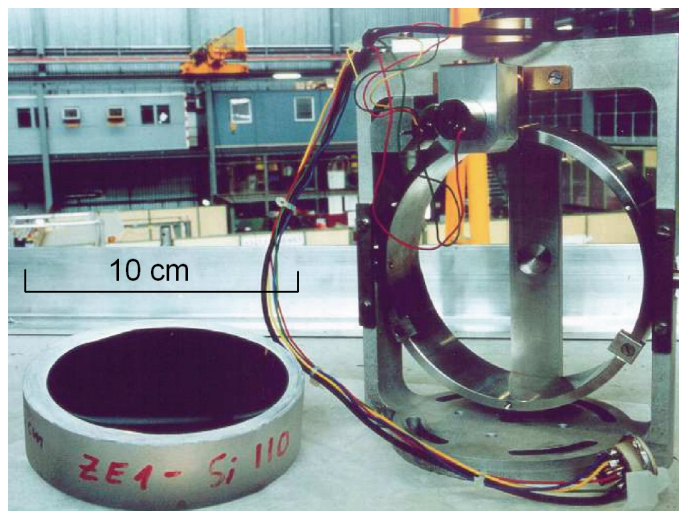


Fig. 1.17 – Photographie d'un cristal et de son support.

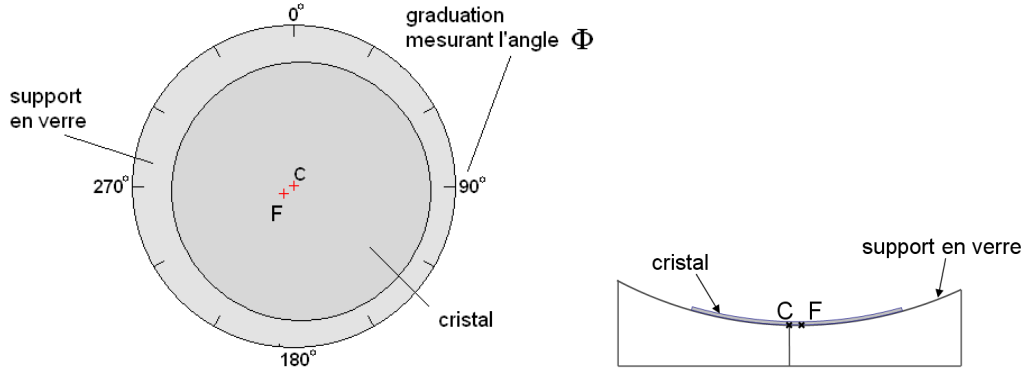
#### III-2-2.a Mesure de l'angle de coupe

L'angle de coupe est l'angle entre la surface optique et les plans cristallins. Nous avons mesuré [COVITA ET AL. 2008] l'angle de coupe des cristaux à l'aide de la machine à haute résolution SEIFERT®XRD 3003 PTS situé au PSI. Cet instrument est constitué de trois éléments principaux : un faisceau collimaté monochromatique de rayons X à 8,041 keV dont on peut régler la taille à l'aide de fentes (de 3 mm à 1 mm), un socle sur lequel on fixe le cristal et qui peut être orienté dans toutes les directions de l'espace, et un détecteur.

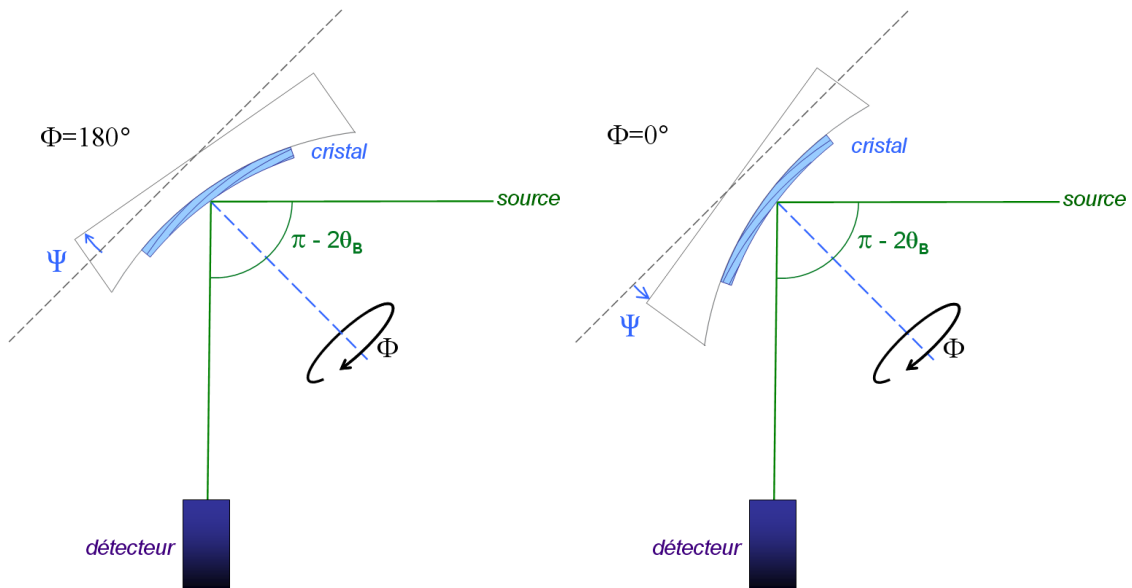
Sur la figure 1.19, l'angle  $\Psi$  représente la projection de l'angle de coupe sur le plan de réflexion. Sur la figure 1.18, on voit la graduation angulaire (angle  $\Phi$ ) gravée sur le cristal, qui est utile car  $\Psi$  dépend de la manière dont est orienté le cristal par rapport au plan de réflexion. Par exemple sur la figure 1.19, on voit que l'angle  $\Psi$  prend des valeurs opposées pour  $\Phi = 0^\circ$  et  $\Phi = 180^\circ$ .

Pour mesurer l'amplitude et l'orientation de l'angle de coupe, il suffit donc de tracer  $\Psi$  en fonction de l'orientation  $\Phi$  du cristal. La figure 1.20 représente une des courbes obtenues pour un des cristaux de silicium. L'amplitude et la phase de la sinusoïde correspondent à celles de l'angle de coupe. Nous avons trouvé pour une quinzaine de cristaux différents des angles de coupe allant jusqu'à  $0,63 \pm 0,01^\circ$ .

Notons que l'empreinte sphérique peut ne pas être parfaitement centrée dans le cylindre : sur les figures 1.18 et 1.21, le point C qui est le centre du support n'est pas confondu avec le point le plus profond F (par rapport au fond plat du support en verre qui sert de référence) de l'empreinte sphérique.

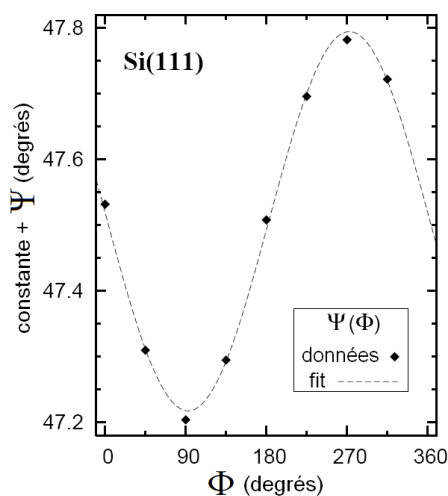


**Fig. 1.18** – Schéma d'un cristal sur son support en verre. la graduation  $\Phi$  sert à repérer l'orientation du cristal. Le point C est le centre du support en verre. Le point F est le point le plus profond de l'empreinte sphérique par rapport au fond plat du support. Il n'est pas nécessairement confondu avec le point C, ce qui signifie que l'empreinte sphérique en forme de calotte n'est pas nécessairement centrée dans le support.

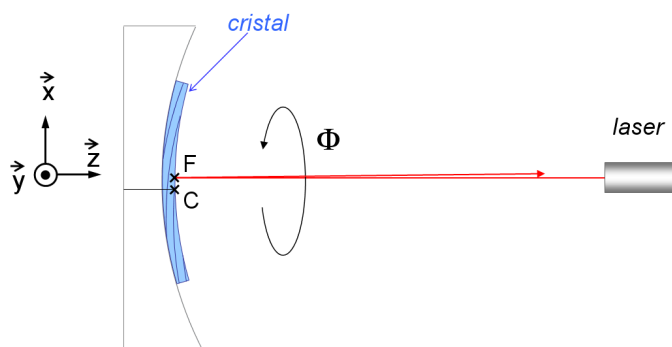


**Fig. 1.19** – Procédure de mesure de l'angle de coupe. L'angle  $\Phi$  fait référence à l'orientation du cristal décrit par la figure 1.18. L'angle  $\Psi$  dépend de cette orientation car il dépend de l'orientation de l'angle de coupe. Pour mesurer l'angle de coupe, il suffit donc de tracer  $\Psi$  en fonction de  $\Phi$ .





**Fig. 1.20** – Angle  $\Psi$  en fonction de l'orientation du cristal  $\Phi$ . Sur cette exemple, l'angle de coupe a une amplitude de  $\alpha = 0,29 \pm 0,01^\circ$ , et est orienté selon  $\Phi_0 = -87,4 \pm 1,2^\circ$  (c'est-à-dire que pour  $\Phi = \Phi_0$  on a  $\Psi = \alpha$ ).



**Fig. 1.21** – Détermination du point autour duquel la surface du cristal reste identique à elle-même dans la rotation autour de  $\vec{z}$ .

Or la rotation du cristal lors de la mesure doit impérativement se faire autour du point  $F$  pour que quelle que soit l'orientation du cristal, la surface optique reste identique à elle-même dans la rotation<sup>1</sup> autour de l'axe  $\vec{z}$  : voir la figure 1.21. Pour positionner le cristal tel que ce point soit sur l'axe  $\vec{z}$ , on utilise un laser. La procédure consiste à changer par translation la position du cristal dans le plan  $(\vec{x}, \vec{y})$  jusqu'à ce que le faisceau laser réfléchi revienne sur lui-même quelle que soit l'orientation du cristal mesuré par l'angle  $\Phi$ .

1. Si l'on n'alignait pas le point  $F$  avec l'axe  $\vec{z}$ , même avec un angle de coupe nul, on observerait que l'angle de réflexion  $\Psi$  changerait en fonction de l'orientation  $\Phi$  du cristal. On ne mesurerait pas l'angle de coupe mais seulement l'effet du décentrage de l'empreinte sphérique par rapport au support en verre.



III-2-2.b Orientation du cristal dans le spectromètre

L'orientation du système détecteur + cristal est repérée par l'angle  $\theta_{arm}$  représenté sur la figure 1.22. L'axe de rotation du cristal dans le référentiel du détecteur est confondu avec l'axe de rotation du système cristal + détecteur et son orientation est repérée par l'angle  $\theta_{crist}$ . Il est aussi possible d'ajuster l'inclinaison verticale du cristal.

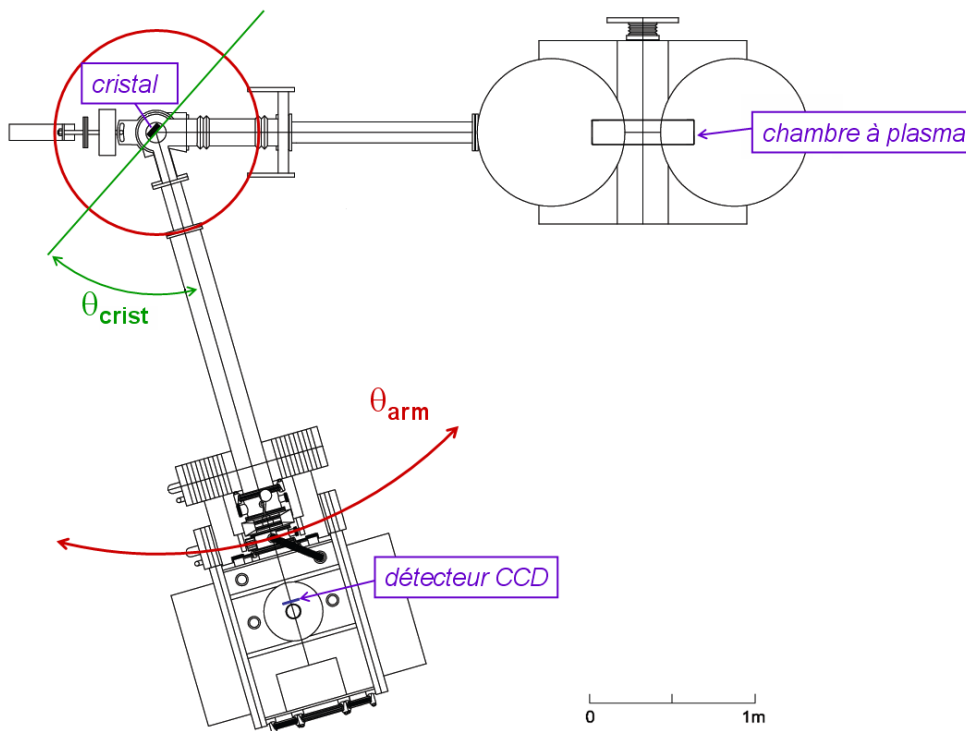
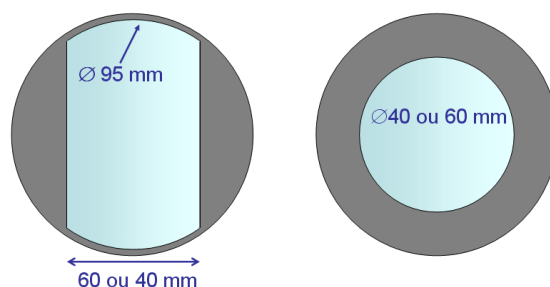


Fig. 1.22 – Schéma des axes de rotation du spectromètre.

III-2-2.c Masques

Les cristaux ne sont pas parfaitement centrés sur leurs supports en verre (voir par exemple les figures 1.17 et 1.18). Afin d'avoir une surface réfléchissante correctement centrée sur l'axe de rotation des cristaux et du détecteur, on a utilisé des masques : une fois appliqués sur les cristaux, la zone réfléchissante est centrée sur l'axe de rotation. D'autre part cela permet de masquer les défauts des cristaux plus importants sur les bords. Les tailles des masques sont décrites par la figure 1.23.



**Fig. 1.23** – Schéma des masques appliqués sur les cristaux qui ont été utilisés lors de l’acquisition des spectres que nous avons étudiés.

#### III-2-3 Détecteur

##### III-2-3.a Positionnement du détecteur

Le détecteur est représenté sur la figure 1.5. L’orientation du système détecteur + cristal est repérée par l’angle  $\theta_{arm}$ , dont l’axe de rotation est confondu avec celui du cristal. Le détecteur est relié à son axe de rotation par un bras composé de tubes mesurés précisément, il peut être translaté le long de ce bras grâce à une platine de translation micrométrique. L’incertitude totale sur la distance détecteur-cristal due à la mesure de la longueur des tubes est de l’ordre de 0,25 mm.

##### III-2-3.b Capteurs CCD

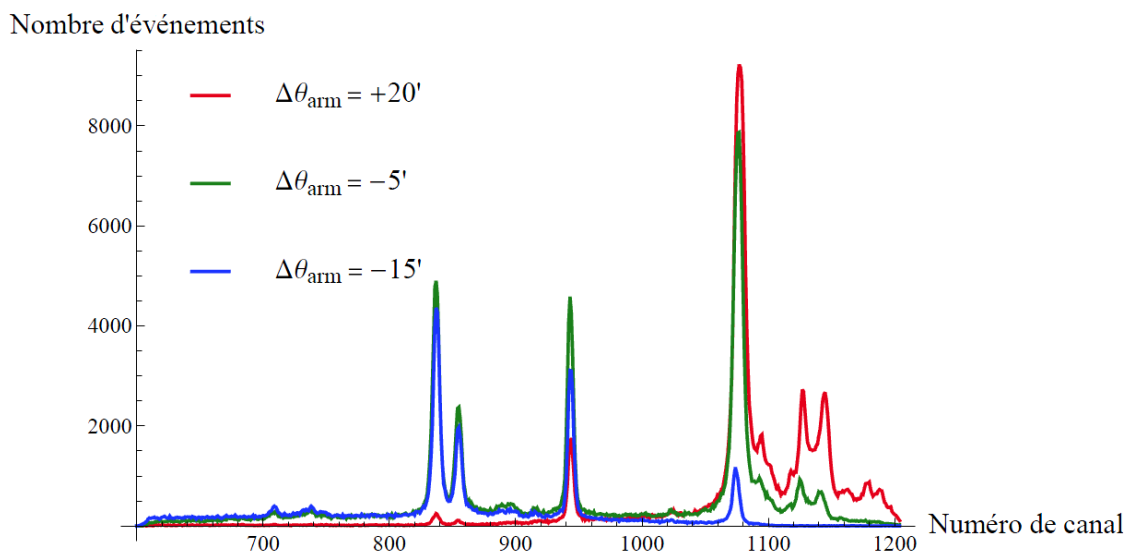
Le détecteur est composé de 6 capteurs CCD de  $610 \times 610$  pixels d’environ  $40 \times 40 \mu\text{m}^2$  chacun. Ils couvrent une surface totale d’environ  $49 \times 73 \text{mm}^2$ . Le détecteur fonctionne en deux temps : l’acquisition où l’énergie des rayons X est convertie en charge électrique par photoionisation des atomes des cristaux de silicium constitutifs des pixels, puis le transfert. Dans le cas de notre expérience, chaque cycle devrait durer environ une minute. Dans les données, sont encodées la position et la charge reçue de chaque pixel. Les contrôleurs électroniques (amplificateurs et pré-amplificateurs) de chacun des capteurs CCD ont une courbe de réponse en énergie qui leur est propre, on doit donc les calibrer lors de l’expérience. L’information relative à la quantité d’énergie reçue par les pixels n’est pas utilisée pour trouver les énergies des transitions car la résolution d’environ 160 eV n’est largement pas suffisante. Elle n’est utilisée que pour sélectionner les événements correspondant à la gamme d’énergie qui nous intéresse, c’est-à-dire pour diminuer le bruit.

Lors de l’analyse, les images à deux dimensions (voir la figure 1.15) sont projetées le long de l’axe vertical pour donner des histogrammes (ou spectres) à une dimension ; nous reviendrons sur cette procédure au § IV-3-1.a. Chaque colonne de pixel correspondra alors à une abscisse appelée « canal » (voir par exemple la figure 1.24).

### III-3 Procédure pour obtenir des spectres

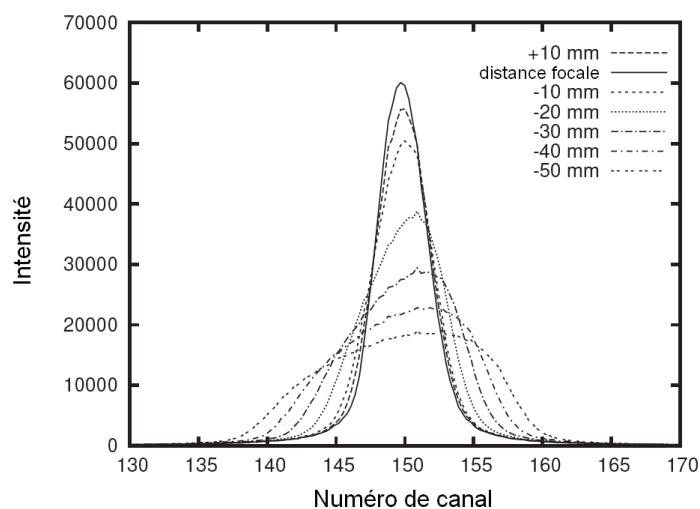
#### III-3-1 Balayage de la source

Le cristal est orienté par rapport à la source de sorte à réfléchir les transitions recherchées, le détecteur est placé par rapport au cristal de sorte à recueillir les rayons réfléchis. Comme nous l'avons déjà évoqué aux paragraphes II-2-2 et II-2-3, les rayons constitutifs d'une raie ne proviennent que d'une région restreinte de la surface d'émission de la source, dont la position moyenne est fonction de l'énergie de la raie en question. L'intensité de la source étant plus importante au centre qu'aux bords, l'intensité des raies observées sur le détecteur varie lorsque l'on change l'orientation du système cristal+détecteur par rapport à la source. On va placer le système cristal+détecteur par rapport à la source de sorte que les rayons qui constituent la raie de référence trouvent leur origine dans la zone centrale de la source, ce qui revient aussi à maximiser son intensité.



**Fig. 1.24** – On représente trois des spectres relevés pendant une procédure de balayage de la source. L'intensité des raies varie en fonction de l'angle de la source par rapport au spectromètre.  $\Delta\theta_{arm}$  désigne l'écart entre  $\theta_{arm}$  et l'angle pour lequel les rayons qui constituent la raie de référence trouvent leur origine au centre de la source.

Comme la source est fixe, c'est l'ensemble cristal+détecteur qui est déplacé en changeant l'angle  $\theta_{arm}$  (voir la figure 1.22). L'intensité de chaque raie varie en fonction de cet angle, ce qui est illustré par la figure 1.24. On trace alors l'intensité de la raie de référence en fonction de  $\theta_{arm}$  et l'on détermine à partir du maximum de la courbe la position optimale du système. Dans cette position, les rayons qui constituent la raie de référence trouvent leurs origines au centre de la source.



**Fig. 1.25** – Les courbes représentent des profils de raies simulés à différentes distances (voir la légende) de la position focale afin d'illustrer l'élargissement que l'on observe sur les raies lors d'une procédure de recherche de la distance focale.

### III-3-2 Recherche de la position de focale de la raie de référence

On va aussi chercher à recueillir les raies sur le détecteur à la distance où elles ont la largeur la plus petite (voir la figure 1.25). Comme à chaque raie correspond sa propre position focale (II-2-2), on choisit à nouveau la raie de référence pour déterminer la meilleure distance cristal-détecteur. On acquiert une série de spectres à différentes distances sur un intervalle d'environ 30 mm. Le réglage se fait grâce à la platine de translation micrométrique (III-2-3.a). La largeur à mi-hauteur de la raie de référence est tracée en fonction de la distance cristal-détecteur. On place le détecteur à la position correspondant au minimum de la courbe.

### III-3-3 Acquisition

Les éléments sont laissés fixes pendant l'acquisition. Nous avons vu qu'un cycle de la caméra dure environ une minute. Un spectre correspond à la somme de ces acquisitions, et peut cumuler dans notre cas jusqu'à 120 minutes.

---

## IV Méthode d'analyse

---

### IV-1 Introduction

Jusqu'à présent, les énergies des raies étaient obtenues en considérant une position unique pour chaque raie, donnée par exemple par le barycentre ou le sommet de la

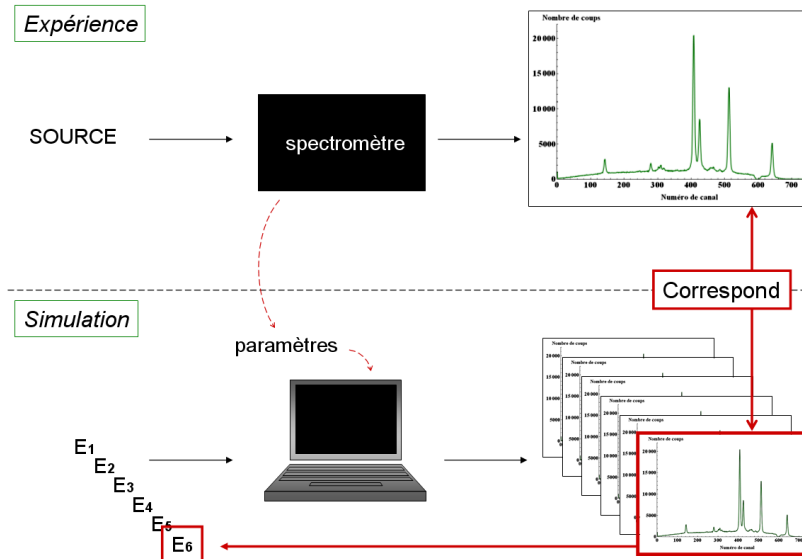


Fig. 1.26 – Schéma du principe de la méthode d'analyse.

raie. A partir de cette position, était obtenue l'énergie en utilisant la loi de Bragg, et ses corrections [DESLATTES and CHANTLER 1995].

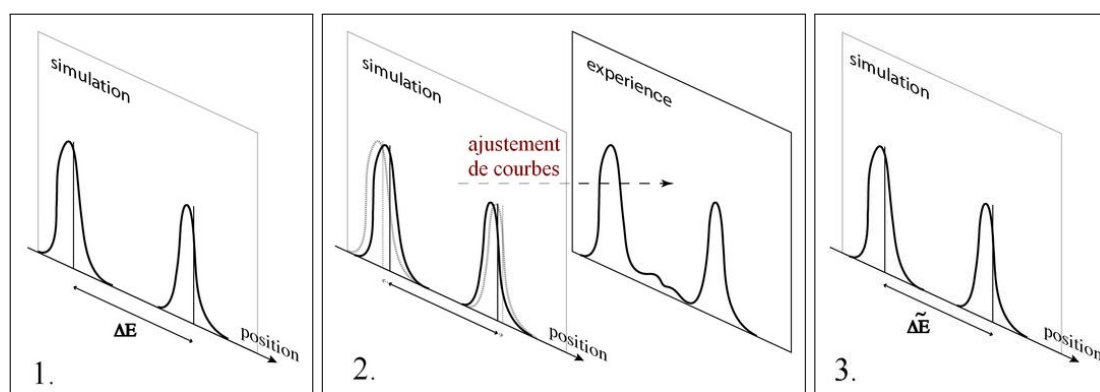
Pourtant, le choix des paramètres que l'on vient d'évoquer n'a *a priori* pas d'origine physique.

En effet, les raies que l'on observe sur le détecteur sont, comme on l'a démontré dans la section II, issues d'une construction géométrique complexe, et on ne connaît pas de formule simple donnant la forme ou la position d'une raie en fonction de son énergie. On va résoudre le problème consistant à relier les raies présentes sur les spectres aux énergies des transitions auxquelles elles correspondent en utilisant une simulation, qui vient en quelque sorte remplacer la fonction de réponse théorique du spectromètre. L'idée consistant à utiliser uniquement la simulation pour établir le lien entre profil de raie et énergie a été introduite un peu avant le début de ma thèse par E. O. Le Bigot.

## IV-2 Résumé de la méthode d'analyse

Les transitions atomiques sont transformées en spectres par le spectromètre ; le programme de simulation reconstitue cette transformation. L'idée sur laquelle repose notre méthode consiste à reproduire les spectres expérimentaux par la simulation, avec comme uniques variables les énergies des raies (voir la figure 1.26). Lorsque l'on parvient à reproduire avec la simulation un spectre identique au spectre expérimental, on a déterminé les valeurs des énergies que l'on cherchait.

En pratique, on procède différemment, car au lieu de produire plusieurs fois chaque raie jusqu'à ce qu'elle se superpose parfaitement à la courbe expérimentale, on va produire une fois seulement en utilisant pour leurs énergies des valeurs proches de celles que l'on cherche, et faire un ajustement fin de leurs positions à l'aide d'un pro-



**Fig. 1.27** – La méthode d'analyse en pratique. En 1. sont représentés les profils obtenus par la simulation, d'écart en énergie  $\Delta E$ . En 2., ces profils sont superposés à l'aide d'un programme d'ajustement de courbes au spectre expérimental, leur « distance » relative (autrement dit leur écart en énergie) est modifiée. En 3. on a le nouvel écart en énergie  $\tilde{\Delta E}$ .

gramme d'ajustement de courbes (voir la figure 1.27).

Emprunter ce raccourci contribue de façon négligeable à l'erreur sur les énergies, les formes des profils changeant très peu pour des variations d'énergie aussi faibles. Pour mesurer le décalage en énergie découlant de cet ajustement, il est nécessaire de choisir une fonction  $f(E) \rightarrow position$  reliant une position conventionnelle du profil que l'on ajuste à son énergie. On va simplement choisir d'utiliser la loi de Bragg ( $f$  = loi de Bragg). La fonction  $f$  que l'on a choisie doit être suffisamment proche de la fonction de dispersion « réelle » du spectromètre pour que l'erreur sur les énergies due à son utilisation pour mesurer les ajustements soit négligeable. En effet, si le résultat de l'ajustement donne un décalage de la raie simulée valant  $\delta\theta$ , il faut que cette quantité se traduise en terme de décalage d'énergie  $\delta E$  de façon suffisamment précise.

Voyons l'ordre de grandeur de l'erreur commise par le fait de choisir cette fonction  $f$  différente de la fonction de dispersion « réelle » du spectromètre (que l'on ne connaît pas). Par exemple, si la fonction de dispersion « réelle » du spectromètre était  $f(\theta) \frac{1}{(1+\epsilon)} = \frac{hc}{2d \sin \theta (1+\epsilon)}$  (expression de la « loi de Bragg corrigée ») où  $\epsilon \ll 1$  est la correction due à l'indice de réfraction, et que la fonction utilisée pour associer énergie et position est  $f(\theta) = \frac{hc}{2d \sin \theta}$  (expression de la loi de Bragg simple), l'erreur relative sur l'énergie à l'ordre un serait égale à  $\epsilon \delta E$ . Donc la fonction choisie convient très bien car  $\delta E$  et  $\epsilon$  sont très petits.

Pour chaque raie dont on recherche l'énergie, on va reproduire à l'aide de la simulation le lieu des impacts des rayons sur le détecteur. Pour cela, on utilise un programme de tracé de rayon (IV-3-2) qui prend en compte les divers paramètres (distances, propriétés et géométrie du cristal (IV-3-2.b), fonction de réponse du cristal (IV-3-2.a), dimensions de la source (IV-3-3)) mis en jeu durant l'expérience. Lors de cette procédure, nous venons de voir que l'on associe de façon univoque à chaque raie un paramètre  $f(E)$  (nous avons choisi l'angle de Bragg), et que c'est cette « marque » qui va servir à mesurer le déplacement de la raie lors de l'ajustement fin (traits verticaux de la figure 1.27), toutes les autres dépendances étant incluses dans la simulation. Pour pouvoir

faire l'ajustement de courbe, on va transformer les raies simulées et l'image expérimentale (à deux dimensions) en histogrammes à une dimension (IV-3-1.a), c'est-à-dire les projeter le long de l'axe des raies. Les raies étant courbées, il est nécessaire d'effectuer une décourbure de l'image 2D avant la projection afin de conserver un maximum de résolution. On dispose alors d'un spectre 1D et de profils de raies simulés utilisables par le programme d'ajustement de courbes. A la fin du processus d'ajustement de courbes par la méthode des moindres carrés, les profils de raies simulés se retrouvent placés sur le spectre expérimental de sorte à se superposer le mieux possible aux profils des raies expérimentales (IV-3-4). On obtient ainsi une position optimisée pour chaque profil de raie simulée, et il suffit d'appliquer la fonction inverse  $f^{-1}(\text{nouvelle position}) \rightarrow E'$  pour trouver l'énergie  $y$  correspondant.

---

### IV-3 Les différentes étapes de l'analyse : présentation détaillée

#### IV-3-1 Extraction des données brutes : programme « CCDM »

On dispose à la fin de l'expérience de fichiers de données qui doivent être traités avant de pouvoir être utilisés dans l'analyse. Grâce à un programme appelé « CCDM », on va produire une image 2D des lieux d'impacts des rayons obtenus pendant l'acquisition. Les données sont recueillies par six capteurs CCD distincts, qui fournissent chacun un fichier de données. Il faut les assembler afin d'obtenir une image complète.

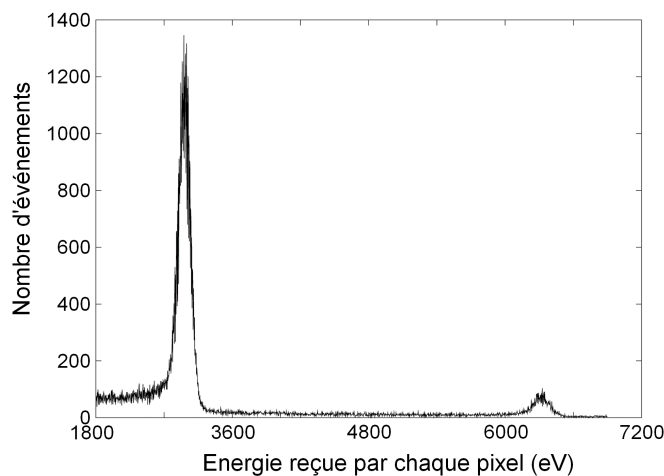
Les capteurs ne sont pas parfaitement alignés les uns par rapport aux autres, il est donc nécessaire de déplacer par rotation et translation les six images des capteurs CCD, de sorte à ce qu'elles soient agencées les unes par rapport aux autres telles que l'étaient les capteurs durant l'expérience. L'étude de ces orientations et du détecteur est détaillée dans [TRASSINELLI ET AL. 2006].

On va également ôter les événements ne correspondant pas à la gamme d'énergie couverte par le spectre que l'on analyse.

Pour cela, on affiche l'histogramme des événements en fonction de leurs énergies, et l'on détermine les limites de l'intervalle d'énergie qui nous intéresse. On doit également accepter les intervalles d'énergie correspondant à des multiples de l'intervalle d'énergie principal car ils correspondent aux cas de pixels ayant reçu plusieurs photons pendant la durée d'acquisition (voir la figure 1.28).

#### IV-3-1.a Projection 2D vers 1D

Ce programme sert également à faire la projection de l'image 2D vers le spectre 1D servant au programme d'ajustement de courbes. Pour ce faire, il calcule préalablement les paramètres qui serviront à décourber l'image (figure 1.15). Pour cela on choisit une raie isolée qui se distingue bien, et le programme ajuste les paramètres d'une parabole  $a + by + cy^2$  sur la répartition de densité de cette raie. Le sommet est tangent à l'axe vertical, et les trois paramètres  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont ajustables. Une transformation permettant de passer de la parabole à une droite est alors appliquée à l'image dans son ensemble, car l'essentiel est que toutes les raies d'un même spectre subissent la même transfor-



**Fig. 1.28** – Distribution des énergies reçues par les pixels pendant l'acquisition d'un spectre. Le pic principal correspond à la gamme d'énergie des raies que l'on étudie. Le second pic (le moins intense) est constitué d'événements ayant deux fois plus d'énergie, qui correspondent en réalité au cas des pixels ayant reçu deux coups. Plus l'intensité de la source est grande pendant l'intervalle de temps d'acquisition, plus la part des pics multiples de l'énergie principale croît.

mation de décourbure. Les différents profils simulés subissent la même procédure de décourbure où les paramètres sont calculés à partir de la même raie simulée.

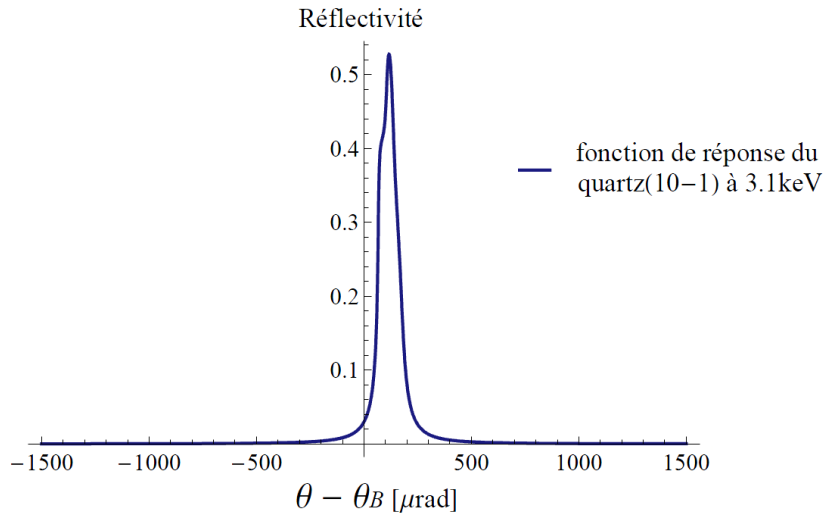
#### IV-3-2 Obtention des profils de raies simulés par méthode de Monte-Carlo : programme « xtrack »

Le programme de tracé de rayons « xtrack » écrit par L. Simons simule l'expérience. Pour chaque raie, le programme tire aléatoirement (méthode de Monte-Carlo) les coordonnées décrivant la trajectoire d'un rayon X d'énergie  $E$  très proche de l'énergie recherchée qui peut être émis par la source, réfléchi par le cristal et arriver sur le détecteur. La probabilité pour que le rayon soit réfléchi par le cristal est donnée par la valeur que prend la fonction de réponse (figure 1.29) à l'angle d'incidence du rayon. Cette opération est répétée jusqu'à obtenir une raie constituée de suffisamment d'événements, pour que la statistique ne soit pas un facteur limitant. Le programme fournit un fichier contenant toutes les coordonnées servant à tracer la trajectoire suivie par chaque rayon. Notons que grâce à ces coordonnées, on va entre autres pouvoir implémenter *a posteriori* la fonction de répartition d'intensité de la source (IV-3-3).

##### IV-3-2.a Fonction de réponse des cristaux : programme « Xop »

Le programme *xcrystal* de Xop [SÀNCHEZ DEL RÌO and DEJUS 2004] fournit la réponse du cristal à une énergie donnée en calculant les interférences multiples issues des réflexions de l'onde par les plans du cristal. On fournit au programme les paramètres suivants : la nature du cristal ainsi que son plan de coupe, la valeur approximative de l'énergie ainsi que la température du cristal relevée pendant l'expérience.





**Fig. 1.29** – Exemple de fonction de réponse du quartz(10-1) à 3.1 keV. La réflectivité est tracée en fonction de l'angle d'incidence  $\theta$  auquel on soustrait  $\theta_B$ .

Les fonctions de réponse (voir la figure 1.29) ont une largeur finie, et sont légèrement décentrées par rapport à l'angle  $\theta_B$  que l'on obtient en utilisant la loi de Bragg qui n'est, on le rappelle, qu'une approximation.

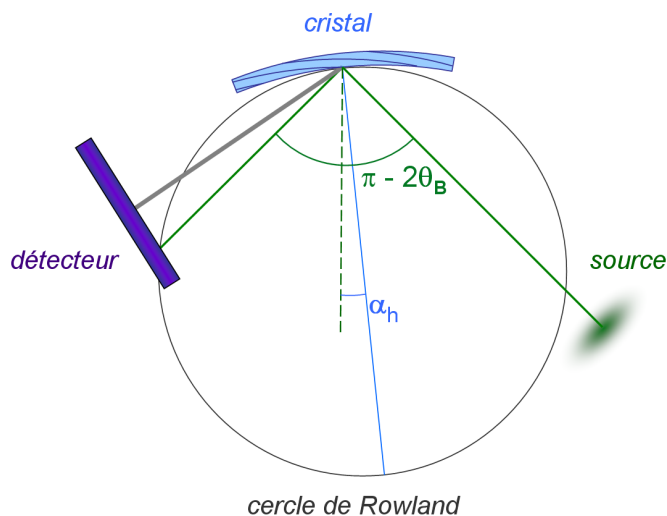
#### IV-3-2.b Liste des paramètres à implémenter dans le programme de tracé de rayon

Le but est de fournir au programme les paramètres qui permettent de reproduire la configuration de l'expérience. Les paramètres suivants sont directement implémentés : le rayon de courbure, l'espace interréticulaire ( $2d$ ) du cristal, la distance cristal-détecteur, la distance cristal-source, les dimensions de la fente placée devant la source, les dimensions du masque placé sur le cristal, les dimensions du détecteur, l'amplitude et l'orientation de l'angle de coupe.

D'autres paramètres doivent être calculés (voir la figure 1.30) : il s'agit des orientations du cristal et du détecteur dans l'espace. En effet, les angles  $\theta_{arm}$  et  $\theta_{crist}$  décrits sur la figure 1.22 ne sont pas mesurés de façon absolue, ils ne servent qu'à mesurer des déplacements.

Pour fixer les orientations du cristal et du détecteur, on va se servir de la loi de Bragg et de la raie de référence dont l'énergie théorique est connue avec une précision (0.5 meV ou 0.4 meV selon l'élément) qui se trouve être au-delà de celle que l'on cherche à atteindre avec notre analyse (quelques meV). Tous les résultats sont donc issus d'une mesure relative. Dans l'ensemble des résultats présentés ici, la raie de référence est la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ , dont les valeurs théoriques sont données dans le tableau 1.15 de la section V et sont issues de [ARTEMYEV ET AL. 2005]. On oriente le cristal par rapport au détecteur de sorte que la raie de référence occupe la même position sur le détecteur que celle qu'elle occupe sur le spectre expérimental.

En ce qui concerne la position de la source, elle est déterminée à partir des données expérimentales du balayage de la source qui établit une correspondance entre l'angle



**Fig. 1.30** – Pour trouver les angles à fournir au programme de tracé de rayons, on utilise la loi de Bragg. Sur cet exemple, la source est placée de sorte que les rayons constituant la raie de référence d'angle de réflexion  $\theta_B$  trouvent leurs origines au centre de la source. On oriente d'autre part le détecteur par rapport aux plans cristallins de sorte que la raie occupe la même position que sur le spectre expérimental. Enfin, la surface optique du cristal n'est pas parallèle aux plans cristallins : il y a un angle de coupe non nul par rapport à la surface optique qui, projeté sur le plan horizontal, produit un angle  $\alpha_h$ .

lu  $\theta_{arm}$  et la position réelle de la source par rapport aux plans du cristal. Les rayons constituant la raie de référence trouvent en général leurs origines au centre de la source.

Enfin, Pour déterminer une éventuelle inclinaison verticale du cristal, on utilise à nouveau les données expérimentales : des spectres préliminaires aux acquisitions ont été réalisés en utilisant des masques plus petits permettant de center verticalement les réflexions sur le détecteur. Si lors de l'analyse on constate en observant le spectre préliminaire que la zone éclairée de l'image est décentrée par rapport au plan horizontal, on inclut le décalage dans la simulation.

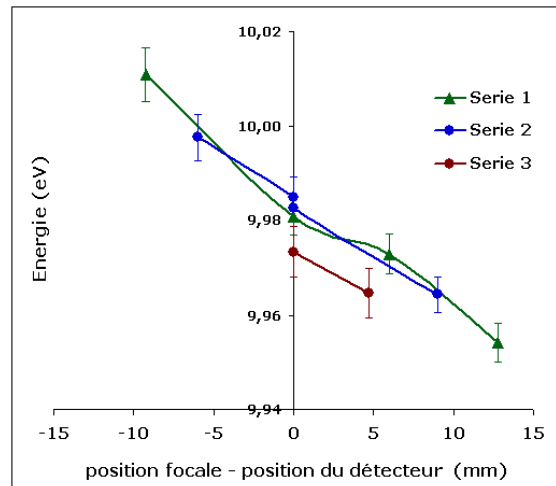
Rappelons que la surface optique peut ne pas être parallèle aux plans du cristal (angle de coupe). L'orientation du cristal que l'on calcule dépend donc de cet angle de coupe à la fois dans le plan de la réflexion (plan horizontal) et dans le plan perpendiculaire au plan de réflexion (plan vertical).

Enfin, le dernier paramètre d'entrée du programme est l'énergie de la raie que l'on souhaite reproduire.

### IV-3-3 Implémentation de la fonction de répartition de l'intensité de la source

Lors des premières analyses, cette répartition d'intensité n'avait pas été prise en compte. Pour tester nos résultats, on avait analysé plusieurs spectres obtenus lors d'une même procédure de détermination de la distance focale de la raie de référence. On avait alors remarqué que les valeurs trouvées pour les énergies évoluaient en fonction de la distance cristal-détecteur, en suivant une pente. Ceci est illustré par la figure 1.31.

D'autre part, plus un spectre avait été réalisé à une grande distance de la position focale, moins les profils de raies simulées reproduisaient bien les raies expérimentales. En comparant les déformations subies par les profils des raies expérimentales et celles subies par les profils des raies simulées lorsque le détecteur s'éloignait de la distance focale, on a remarqué des différences.

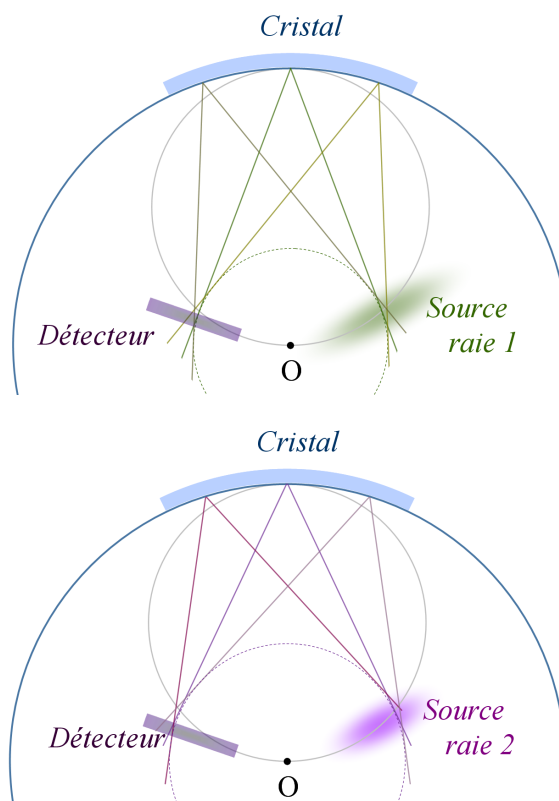


**Fig. 1.31** – Exemple de résultats obtenus pour l'écart en énergie entre les transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  (transition de référence) avant l'introduction de la répartition d'intensité de la source dans l'analyse. Chaque série correspond à une procédure de détermination de la position focale de la raie de référence. Chaque point correspond à un spectre (les barres d'erreurs représentées correspondent uniquement à l'erreur due à l'ajustement de courbes). L'abscisse est la distance entre la position du détecteur et la position focale. On voit que les résultats présentent une pente, ce qui révèle un problème systématique de l'ancienne analyse.

A partir de ce constat, on a supposé que ces problèmes pouvaient provenir d'une inhomogénéité de l'intensité de la source non prise en compte dans la simulation. En effet, les résultats s'expliquent si l'on se souvient de la manière dont sont agencés les rayons constituant une raie (II-2-2 à II-2-4). Chaque raie provient d'une certaine zone de la source, et chaque portion de raie provient d'une partie de cette zone. Ceci est illustré par la figure 1.32. Une inhomogénéité dans la répartition d'intensité de la source se retrouve dans le profil de la raie. Si on ne tient pas compte de la répartition d'intensité de la source, les raies simulées sont déformées par rapport à la réalité de l'expérience.

On va faire en sorte que la répartition des points d'origines (c'est-à-dire au niveau de la source) des rayons formant une raie reproduise la répartition de l'intensité de la source relevée pendant l'expérience. Pour cela, on va éliminer certains des rayons constitutifs de la raie que l'on vient de produire avec une source homogène. La source étant une fente horizontale (1 à 4 mm de hauteur pour 28 mm de largeur), on peut considérer qu'il n'y pas de variation d'intensité le long de l'axe vertical, et ne s'intéresser qu'aux variations dans le plan horizontal. Cela permet, pour trouver la répartition de l'intensité de la source, d'utiliser les spectres relevés pendant le balayage de la source (voir la figure 1.24). Notons que ces spectres n'étant pas à l'origine destinés à être

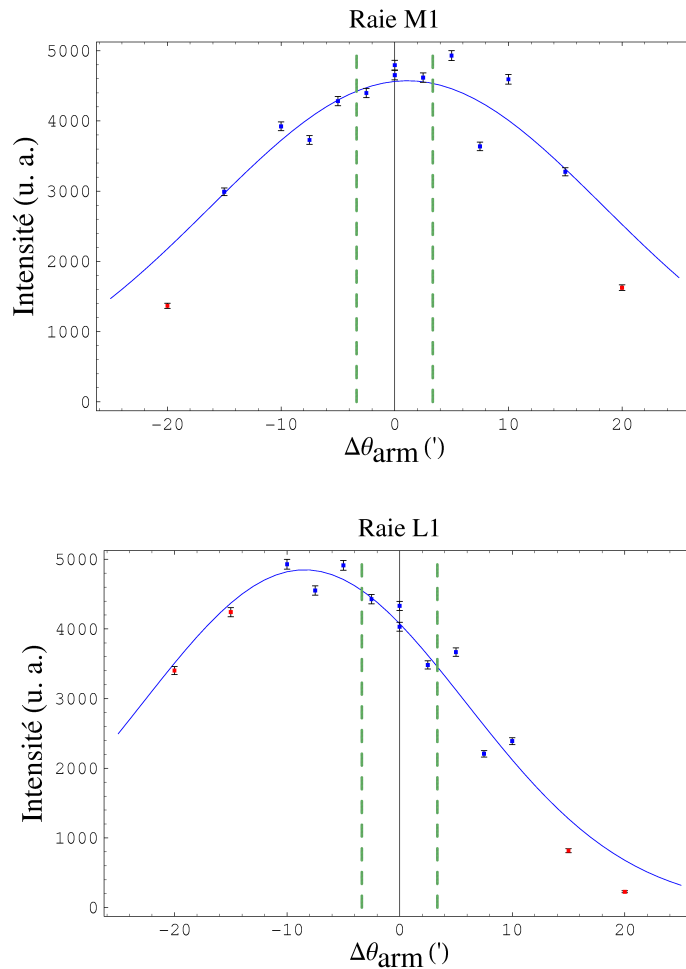
utilisés pour ça, ils n'ont pas toujours été réalisés dans des conditions idéales.



**Fig. 1.32** – Les variations d'intensité sont représentées par les halos. Les schémas du haut et du bas représentent les rayons constitutifs de deux raies différentes. On voit que selon la transition, les raies sont issues de zone différentes de la source, où la variation d'intensité diffère. Ces variations modifient les formes des raies.

On trace l'intensité de chaque raie étudiée en fonction de l'angle du système rigide cristal+détecteur par rapport à la source (voir la figure 1.33). Chacune des courbes est la convolution de la répartition d'intensité dans la source de la transition considérée avec la réponse du système pour cette même transition. Elles ont plus ou moins une allure de Gaussienne. On ne connaît pas la forme théorique de la fonction de répartition de l'intensité de la source (ni celle de la réponse du système), mais comme il s'agit de moduler l'intensité dans la source pour chaque raie sur une petite zone, on peut utiliser une fonction approximative qui s'ajustera suffisamment bien sur la zone concernée (zone entre les pointillés sur la figure 1.33). On modélise la répartition d'intensité de la source par une Gaussienne à paramètres libres (centre, hauteur et largeur) et la réponse du système par une Gaussienne dont la largeur est imposée et déterminée à l'aide du programme de simulation. L'ajustement de courbe nous donne la valeur de la largeur à mi-hauteur de la fonction de répartition Gaussienne que l'on va imposer aux points d'origines des rayons constituant les raies simulées.

A ce stade, on dispose donc d'une collection de raies, qui doivent être projetées (voir le paragraph IV-3-1.a) pour pouvoir être utilisées par le programme d'ajustement de courbes.

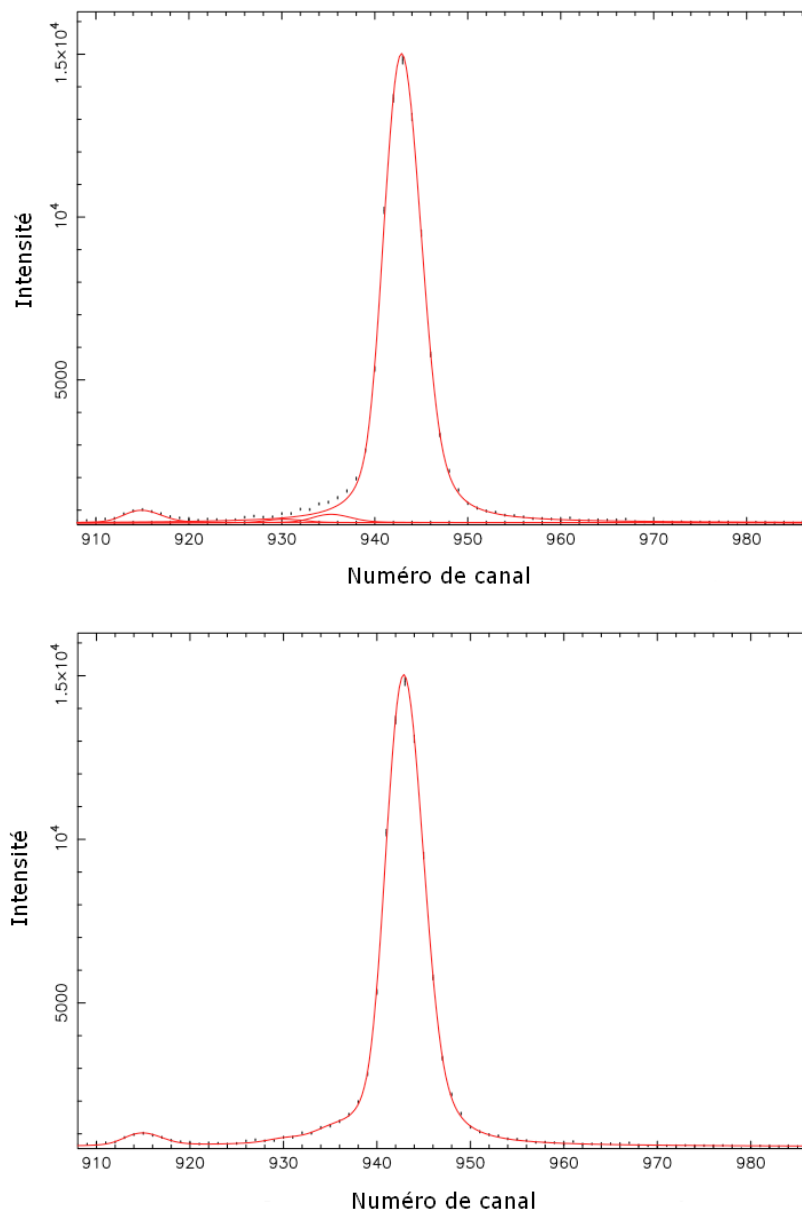


**Fig. 1.33** – Intensité des raies 1 (raie de référence) et 2 en fonction de l’angle  $\Delta\theta_{arm}$  (défini comme pour la figure 1.24). On déduit d’un ajustement de courbe la forme de la répartition d’intensité dans la source effective pour chaque raie. L’intervalle angulaire situé entre les traits pointillés (environ  $6'$  d’arc) correspond aux zones de la source contribuant effectivement à la construction des raies (les zones d’où partent les rayons sur les schémas de la figure 1.32). Seuls les points situés autour de cette zone (colorés en bleu) ont été utilisés pour le fit.

#### IV-3-4 Ajustement de courbes

Le programme place les profils de raies simulés sur le spectre expérimental, en ajustant leurs hauteurs et leur positions. Pour cela, il utilise la méthode des moindres carrés. Il introduit un paramètre ajustable supplémentaire : un facteur d’élargissement des raies. En effet, les profils sont convolués avec une Gaussienne ce qui correspond physiquement à l’élargissement des raies dû aux imperfections des cristaux, et à l’élargissement Doppler. Néanmoins, certaines raies sont plus larges que d’autres, car les largeurs naturelles des niveaux leur correspondant intègrent un élargissement Lorent-

zien dû à l'effet Auger <sup>1</sup>.



**Fig. 1.34** – Exemple de résultat fourni par le programme après l'ajustement des profils simulés pour la raie de la transition M1 de l'argon héliumöide ( $16^+$ )  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ . Sur la figure du bas la courbe rouge est la somme des différentes courbes de la figure du haut.

1. L'état initial de l'ion qui peut se désexciter par émission Auger ou par émission radiative est dégénéré avec un continuum impliquant l'émission d'un photon (émission radiative) et un continuum impliquant l'émission d'un électron (émission Auger). C'est l'effet du couplage avec le continuum électronique qui introduit l'élargissement et le décalage Auger que l'on cherche à mesurer. Voir [COHEN-TANNOUJJI ET AL. 1977, chap.XIII] par exemple.

L'élargissement Gaussien calculé par le programme tient alors un rôle supplémentaire, tentant de compenser l'élargissement Lorentzien dû aux l'élargissements radiatif et Auger. On verra à la section V-4-2, comment améliorer l'analyse en remplaçant le facteur d'élargissement Gaussien dont se sert la procédure d'ajustement de courbes, par un élargissement Lorentzien plus approprié.

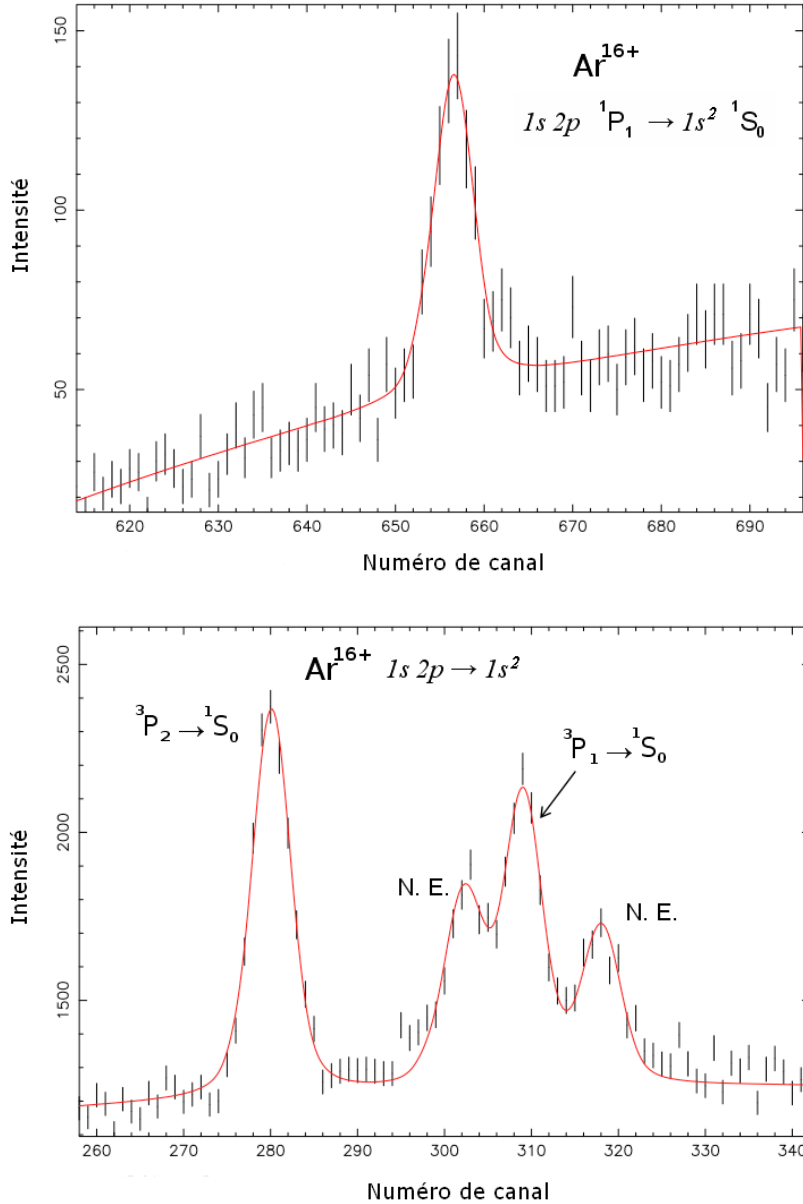


Fig. 1.35 – Résultats fournis par le programme après l'ajustement des profils simulés pour les raies des transitions  $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  (figure du haut),  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  et  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  (figure du bas) de l'argon héliumoïde ( $16^+$ ). Les raies notées N. E. n'ont pas encore été étudiées.

En pratique, on place d'abord les raies qui se distinguent le mieux, puis on ajoute les raies peu intenses. On reproduit alors la courbe expérimentale le mieux possible afin d'optimiser l'ajustement de la position des raies les plus intenses. Les figures 1.34, 1.35, 1.36, 1.37 et 1.38 montrent des exemples de résultats fournis par le programme après l'ajustement des profils simulés.

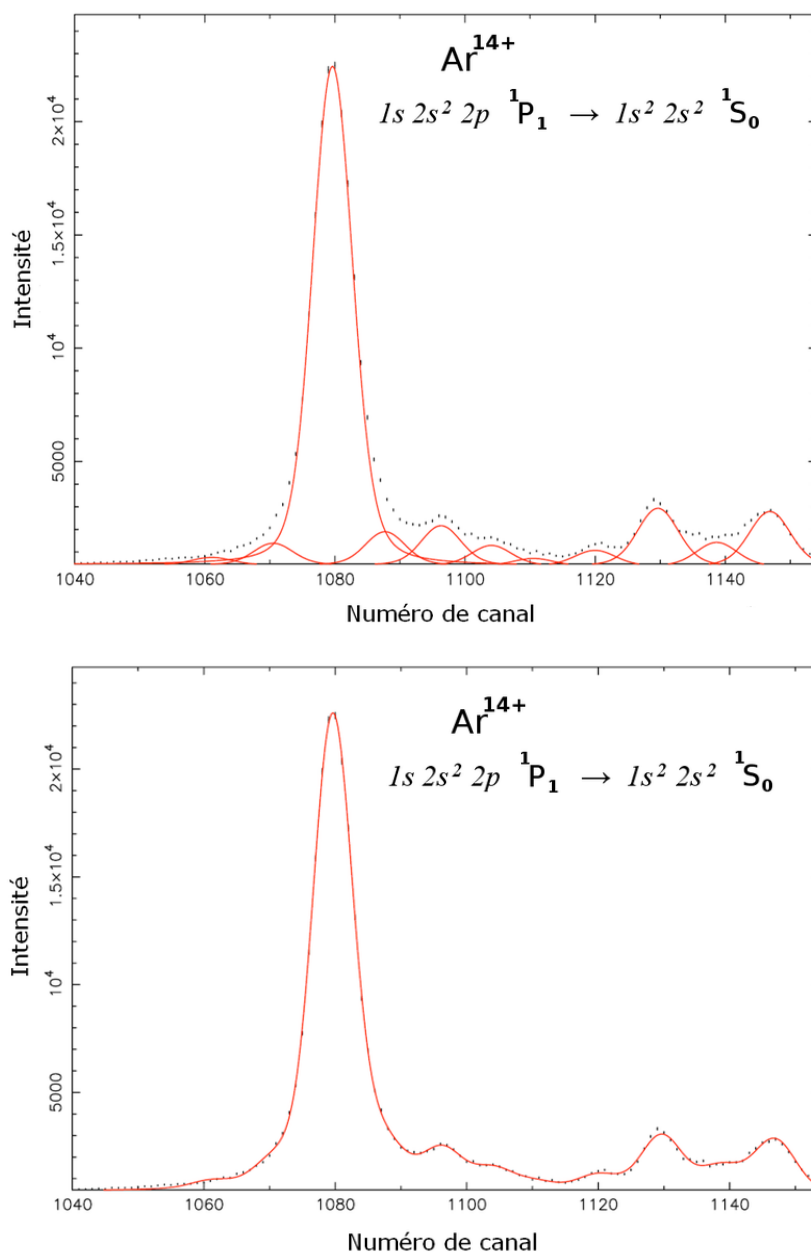


Fig. 1.36 – Résultat fourni par le programme après l'ajustement des profils simulés pour la raie de la transition  $1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$  de l'argon bérylliumoïde ( $14^+$ ). Sur la figure du bas la courbe en trait continu rouge est la somme des différentes courbes de la figure du haut.



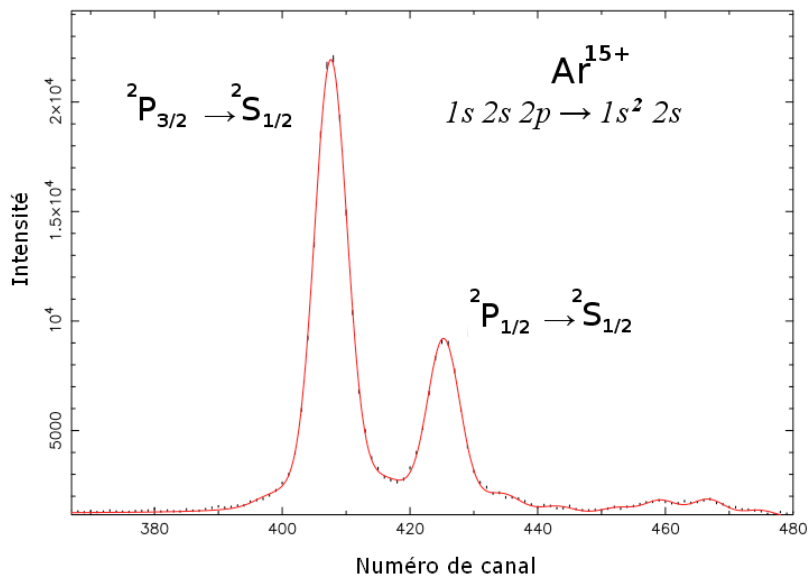


Fig. 1.37 – Résultat fourni par le programme après l’ajustement des profils simulés pour les raies des transitions  $1s 2s 2p \ 2P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s \ 2S_{1/2}$  et  $1s 2s 2p \ 2P_{1/2} \rightarrow 1s^2 2s \ 2S_{1/2}$  de l’argon lithumioïde ( $15^+$ ).

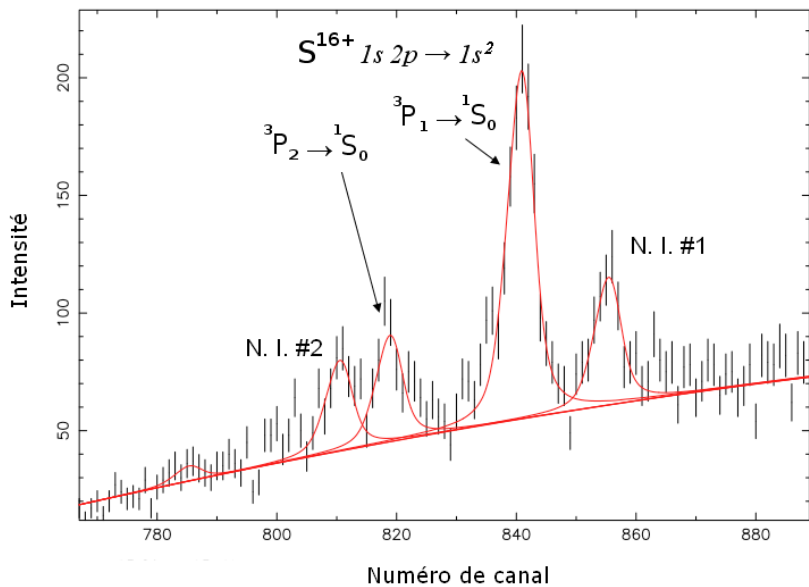


Fig. 1.38 – Résultat fourni par le programme après l’ajustement des profils simulés pour les raies des transitions  $1s 2p \ 3P_1 \rightarrow 1s^2 \ 1S_0$  et  $1s 2p \ 3P_2 \rightarrow 1s^2 \ 1S_0$  du soufre  $14^+$ , et deux raies de transitions non identifiées du soufre.

---

## V Résultats

---

### V-1 Incertitudes

Nous allons maintenant discuter les contributions à l'incertitude. Nous avons effectué de nombreux tests portant sur l'importance des contributions des différents paramètres entrant en jeu. L'incertitude sur les valeurs des paramètres utilisés lors de l'analyse induit une contribution à l'incertitude sur l'énergie. Dans les résultats présentés ici, on a tenu compte de l'erreur induite par les incertitudes sur la valeur de l'espace interréticulaire des cristaux, sur la valeur du rayon de courbure du cristal, sur la distance du détecteur au cristal, sur l'erreur due au désalignement du cristal par rapport au bras du détecteur, sur la répartition d'intensité de la source, et on a bien sûr tenu compte de l'incertitude retournée par le programme d'ajustement de courbes.

Le fait d'avoir analysé de nombreux spectres réalisés à l'aide de dispositifs dont les éléments différaient (cristal, longueur du bras reliant le détecteur au cristal, taille du masque, etc) permet de vérifier la consistance des résultats.

Toutes les incertitudes sont données dans les tableaux récapitulatifs de la section [V-2](#).

#### V-1-1 Incertitude due à la répartition d'intensité de la source

Pour évaluer cette incertitude, nous avons testé l'effet de ce paramètre dans l'analyse en le faisant varier dans l'intervalle que suggérait l'imprécision des données permettant de le fixer. Il est l'une des plus importantes contributions à l'erreur systématique et contribue à hauteur de 15% à 35% environ.

#### V-1-2 Position du masque du cristal

Un léger désalignement de la surface réfléchissante du cristal par rapport au centre de rotation (par lequel passe le bras mécanique supportant le détecteur) modifie la distance réelle entre le détecteur et le cristal. L'incertitude sur l'alignement du masque (qui détermine la surface réfléchissante) par rapport au centre de rotation est estimée à 0,2 mm, ce qui contribue à l'erreur systématique totale à hauteur de 15% environ.

#### V-1-3 Distance cristal-détecteur

Les éléments composant le bras mécanique soutenant le détecteur ont été mesurés micrométriquement. C'est à partir de ces longueurs que l'on détermine la distance cristal-détecteur. Pour chaque dispositif utilisé (qui dépend de la gamme d'énergie que l'on observe et du type de cristal), les erreurs cumulées dues aux différents éléments constituant le bras sont d'environ 0.26 mm, ce qui contribue à l'erreur systématique totale à hauteur de 25% environ.

#### V-1-4 Rayons de courbures des cristaux

De nombreux efforts utilisant diverses méthodes (mécaniques ou optiques) pour déterminer le plus précisément possible les rayons de courbures ont été fournis. Malgré cela, on constate des différences de quelques millimètres (sur un rayon de 3 m) entre les valeurs trouvées. Une erreur sur le rayon du cristal influe sur les résultats d'une analyse, car les formes des profils de raies dépendent du rayon de courbure. En faisant varier le rayon du cristal dans la simulation, on a pu évaluer l'influence de ce paramètre sur les résultats. Il contribue à l'erreur systématique totale à hauteur de 15% environ.

#### V-1-5 Espace interréticulaire

L'incertitude sur l'espace interréticulaire contribue à l'erreur systématique totale à hauteur de 10% environ lorsqu'il s'agit d'un cristal de quartz. L'erreur sur les énergies due à l'incertitude sur l'espace interréticulaire du silicium est en revanche négligeable.

#### V-1-6 Correction due à la courbure du cristal

Le fait de courber le cristal déforme le réseau cristallin. La distance interréticulaire change d'un endroit à l'autre du volume du cristal (voir la figure 1.39). On est en principe capable de calculer la correction sur l'espace interréticulaire due à cet effet, cependant, l'étude qui le permettrait n'a pas encore été effectuée. On peut toutefois évaluer l'ordre de grandeur de la correction aux énergies. Si l'on prend l'exemple du Si111, et que l'on considère la déformation comme étant isotrope, on sait [CEMBALI ET AL. 1992 ; CHUKHOVSKII ET AL. 1996] que la distance interréticulaire corrigée, c'est-à-dire la valeur que l'on doit utiliser dans la loi de Bragg est donnée par la formule suivante :

$$d = d_0 \left( 1 + \frac{2\nu}{1-\nu} \frac{t/2}{R} \right), \quad (1.5)$$

où  $d_0$  est la distance interréticulaire du cristal ne subissant pas de déformation,  $\nu$  le coefficient de Poisson du matériau, et  $t$  l'épaisseur du cristal.

Faute de pouvoir dès à présent inclure cet effet dans l'analyse, on va inclure une incertitude supplémentaire dans nos résultats correspondant à l'ordre de grandeur de la correction à l'énergie due à cet effet. Ce paramètre contribue à l'erreur systématique totale à hauteur de 5% environ.

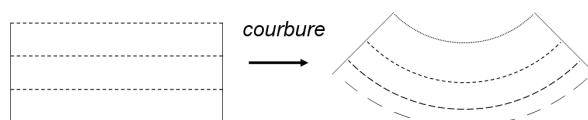
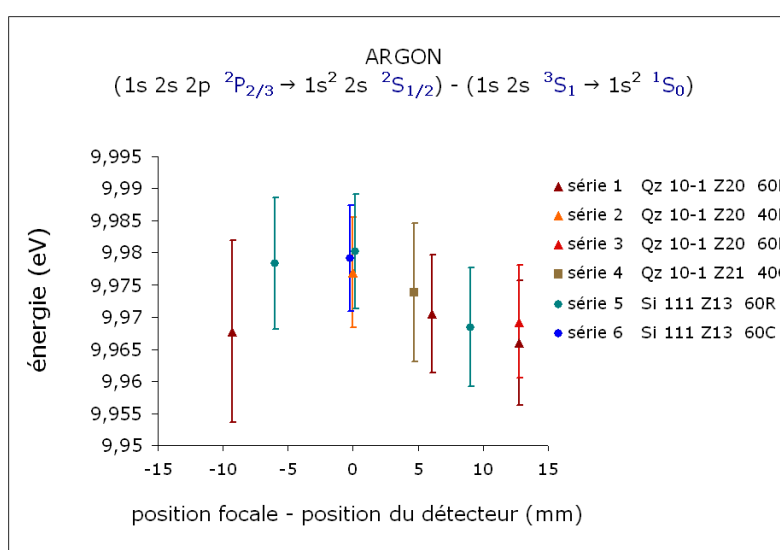


Fig. 1.39 – A gauche est représenté en vue de coupe un élément de volume du cristal non courbé. A droite, la courbure a pour effet d'écartier les plans cristallins dans la zone interne, et de les rapprocher dans la zone externe.

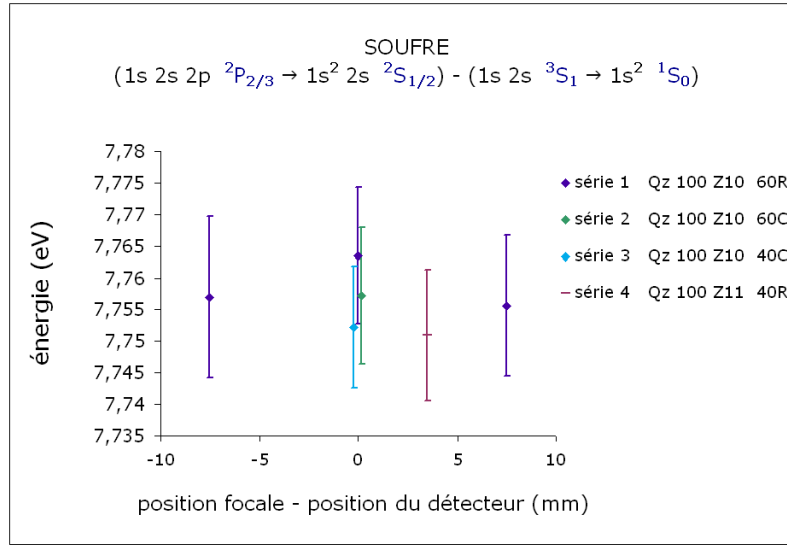
## V-2 Résumé des résultats

Pour tester la stabilité de nos résultats, nous avons à nouveau (voir IV-3-3) analysé des spectres réalisés à différentes distances du cristal, c'est-à-dire, obtenus lors de la procédure de détermination de la distance focale de la raie de référence. Si les résultats sont probablement perfectibles à l'aide d'un meilleur étalonnage de la densité d'intensité de la source, nous ne trouvons plus les pentes caractéristiques des anciens résultats (IV-3-3, figure 1.31), comme cela est illustré par les figures 1.40, 1.41, 1.42.

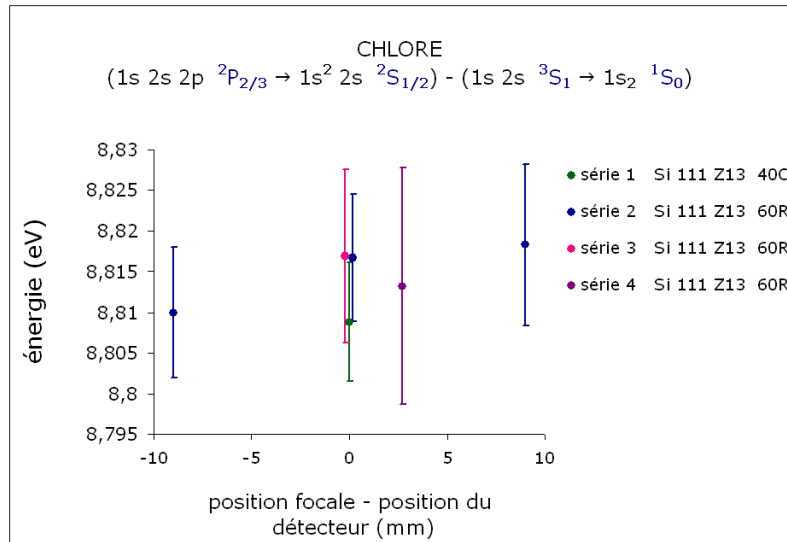


**Fig. 1.40** – Résultats pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ 2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ 2S_{1/2}$  de l'argon  $15^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ 3S_1 \rightarrow 1s^2\ 1S_0$  de l'argon  $16^+$ . Chaque point correspond au résultat de l'analyse d'un spectre. Les spectres ayant été effectués pendant une même procédure de détermination de la distance focale pour lesquels seule la distance détecteur-cristal (en abscisse) diffère d'un spectre à l'autre, sont regroupés en séries. La taille du masque appliqué sur le cristal est donnée dans la légende par les symboles 40C, 60C, 40R, ou 60R, ce qui fait référence à leurs formes décrites au paragraphe III-2-2.c : R correspond à un masque de forme verticale, C désigne un masque de forme circulaire. Les caractéristiques des cristaux correspondant aux spectres sont données par la légende, Zxx désigne le nom du cristal.

On a regroupé les spectres ayant été réalisés avec le même dispositif expérimental, c'est-à-dire avec le même type de cristal. Au sein de chaque groupe la valeur des incertitudes systématiques dues aux différents paramètres (distance cristal-détecteur, espace interréticulaire etc) est la même pour chaque spectre. Pour chaque groupe on calcule la moyenne pondérée  $E_g$  des énergies en prenant l'incertitude statistique comme facteur de poids dans le calcul (les incertitudes systématiques étant les mêmes pour tous les spectres d'un même groupe), c'est-à-dire  $E_g = \frac{\sum_i E_i / \sigma_i^2}{\sum_i 1 / \sigma_i^2}$  (où  $\sigma_i$  est l'erreur statistique).



**Fig. 1.41** – Résultats pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du soufre  $13^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$ . Voir la figure 1.40 pour les conventions appliquées à la légende.



**Fig. 1.42** – Résultats pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du chlore  $14^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du chlore  $15^+$ . Voir la figure 1.40 pour les conventions appliquées à la légende.

Enfin, pour rassembler ces résultats en une valeur moyenne, on calcule la moyenne  $E$  des énergies  $E_g$  en leur affectant un poids  $1/\sigma_g^2$  où  $\sigma_g$  est égal à la somme quadratique<sup>1</sup> des différentes incertitudes (incertitude statistique, position du masque, distance cristal-détecteur, ...) relatives à chaque groupe. Les incertitudes données correspondent à une

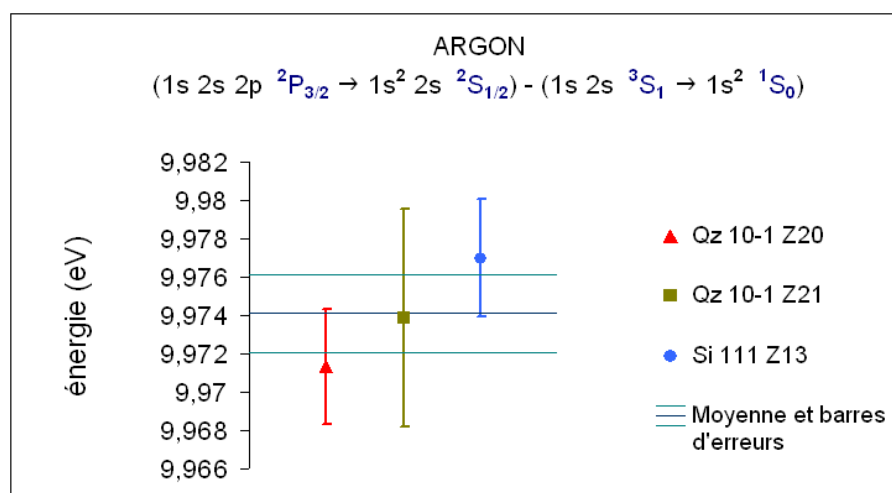
1. C'est-à-dire la racine carrée de la somme des carrés.

déviations standard.

Nous présentons dans les tableaux 1.1 à 1.14 les résultats détaillés pour les transitions étudiées. Dans tous nos calculs, les constantes fondamentales sont issues de [MOHR ET AL. 2008] :  $h = 4.13566733(10) \cdot 10^{-15}$  eV s,  $c = 299792458$  m s $^{-1}$ .

ARGON			
$(1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$			
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(10-1) / Z21 5	Qu(10-1) / Z20 1	Si(111) / Z13 4
Energie	9,9713	9,9739	9,9770
Incertitude totale	0,0031	0,0058	0,0031
Incertitude statistique	0,0017	0,0052	0,0018
Incertitude systématique totale	0,0026	0,0026	0,0026
Déplacement du masque	0,00092	0,00090	0,00082
Intensité de la source	0,00150	0,00150	0,00150
Distance cristal-détecteur	0,00138	0,00137	0,00127
Rayon du cristal	0,00100	0,00100	0,00100
Valeur du $2d$	0,00063	0,00063	0,00000
Courbure du cristal	0,00028	0,00028	0,00092
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>9,9741</b>		
<b>Incertitude</b>	<b>0,0021</b>		

**Tab. 1.1** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  de l'argon  $15^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$ . Zxx désigne le nom du cristal.



**Fig. 1.43** – Représentation graphique des résultats obtenus pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  de l'argon  $15^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$  en fonction du cristal utilisé.

SOUFRE		
$(1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(100) / Z10 5	Qu(100) / Z11 1
Energie	7,7565	7,7509
Incertitude totale	0,0038	0,0055
Incertitude statistique	0,0023	0,0046
Incertitude systématique totale	0,0030	0,0030
Déplacement du masque	0,00070	0,00069
Intensité de la source	0,00250	0,00250
Distance cristal-détecteur	0,00107	0,00106
Rayon du cristal	0,00078	0,00078
Valeur du $2d$	0,00058	0,00057
Courbure du cristal	0,00022	0,00022
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>7,7547</b>	
<b>Incertitude</b>	<b>0,0031</b>	

Tab. 1.2 – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du soufre  $13^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$ . Zxx désigne le nom du cristal.

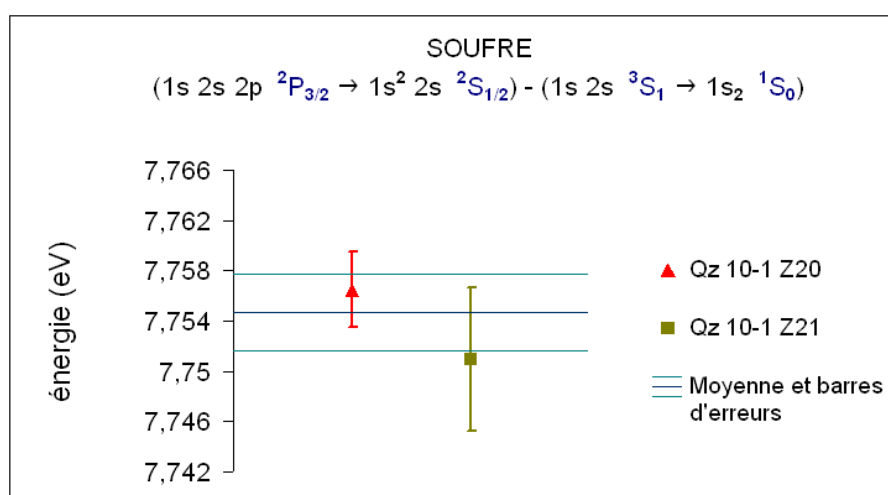


Fig. 1.44 – Représentation graphique des résultats obtenus pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du soufre  $13^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$  en fonction du cristal utilisé.

CHLORE	
$(1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$	
type / nom du cristal nombre de spectres	Si(111) / Z13 6
<b>Energie</b>	<b>8,8126</b>
<b>Incertitude totale</b>	<b>0,0027</b>
Incertitude statistique	0,0017
Incertitude systématique totale	0,0021
Déplacement du masque	0,00058
Intensité de la source	0,00100
Distance cristal-détecteur	0,00100
Rayon du cristal	0,00089
Valeur du $2d$	0,00000
Courbure du cristal	0,00099

**Tab. 1.3** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du chlore  $14^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du chlore  $15^+$ .  $Zxx$  désigne le nom du cristal.

ARGON			
$(1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$			
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(10-1) / Z21 5	Qu(10-1) / Z20 1	Si(111) / Z13 4
Energie	8,3007	8,3031	8,3049
Incertitude totale	0,0030	0,0079	0,0032
Incertitude statistique	0,0023	0,0076	0,0026
Incertitude systématique totale	0,0020	0,0020	0,0020
Déplacement du masque	0,00076	0,00075	0,00068
Intensité de la source	0,00100	0,00100	0,00100
Distance cristal-détecteur	0,00115	0,00114	0,00106
Rayon du cristal	0,00084	0,00084	0,00084
Valeur du $2d$	0,00053	0,00053	0,00000
Courbure du cristal	0,00024	0,00024	0,00077
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>8,3027</b>		
<b>Incertitude</b>	<b>0,0021</b>		

**Tab. 1.4** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  de l'argon  $15^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$ .  $Zxx$  désigne le nom du cristal.



SOUFRE		
$(1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(100) / Z10 5	Qu(100) / Z11 1
Energie	6,7661	6,7593
Incertitude totale	0,0055	0,0083
Incertitude statistique	0,0035	0,0071
Incertitude systématique totale	0,0043	0,0043
Déplacement du masque	0,00061	0,00060
Intensité de la source	0,00400	0,00400
Distance cristal-détecteur	0,00093	0,00093
Rayon du cristal	0,00068	0,00068
Valeur du $2d$	0,00050	0,00050
Courbure du cristal	0,00020	0,00020
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>6,7640</b>	
<b>Incertitude</b>	<b>0,0046</b>	

**Tab. 1.5** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du soufre  $13^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$ .  $Zxx$  désigne le nom du cristal.

CHLORE	
$(1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$	
type / nom du cristal nombre de spectres	Si(111) / Z13 6
<b>Energie</b>	<b>7,5130</b>
<b>Incertitude totale</b>	<b>0,0050</b>
Incertitude statistique	0,0026
Incertitude systématique totale	0,0043
Déplacement du masque	0,00049
Intensité de la source	0,00400
Distance cristal-détecteur	0,00086
Rayon du cristal	0,00076
Valeur du $2d$	0,00000
Courbure du cristal	0,00085

**Tab. 1.6** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du chlore  $14^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du chlore  $15^+$ .  $Zxx$  désigne le nom du cristal.

ARGON		
$(1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(10-1) / Z21 4	Si(111) / Z13 3
Energie	-12,3765	-12,3690
Incertitude totale	0,0048	0,0045
Incertitude statistique	0,0032	0,0027
Incertitude systématique totale	0,0036	0,0036
Déplacement du masque	0,00111	0,00100
Intensité de la source	0,00250	0,00250
Distance cristal-détecteur	0,00170	0,00156
Rayon du cristal	0,00124	0,00124
Valeur du $2d$	0,00078	0,00000
Courbure du cristal	0,00035	0,00113
<b>Moyenne pondérée Incertitude</b>	<b>-12,3725 0,0033</b>	

**Tab. 1.7** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $14^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$ . Zxx désigne le nom du cristal.

ARGON		
$(1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(10-1) / Z21 4	Qu(10-1) / Z20 1
Energie	19,349	19,299
Incertitude totale	0,014	0,032
Incertitude statistique	0,011	0,030
Incertitude systématique totale	0,0090	0,0090
Déplacement du masque	0,0018	0,0018
Intensité de la source	0,0080	0,0080
Distance cristal-détecteur	0,0027	0,0027
Rayon du cristal	0,0020	0,0020
Valeur du $2d$	0,0013	0,0013
Courbure du cristal	0,0006	0,0006
<b>Moyenne pondérée Incertitude</b>	<b>19,341 0,013</b>	

**Tab. 1.8** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$ . Zxx désigne le nom du cristal.

ARGON		
$(1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(10-1) / Z21 4	Qu(10-1) / Z20 1
Energie	22,135	22,197
Incertitude totale	0,012	0,031
Incertitude statistique	0,0070	0,030
Incertitude systématique totale	0,0093	0,0093
Déplacement du masque	0,0021	0,0020
Intensité de la source	0,0080	0,0080
Distance cristal-détecteur	0,0031	0,0031
Rayon du cristal	0,0023	0,0023
Valeur du $2d$	0,0014	0,0015
Courbure du cristal	0,0007	0,0007
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>22,143</b>	
<b>Incertitude</b>	<b>0,011</b>	

**Tab. 1.9** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$ . Zxx désigne le nom du cristal.

ARGON		
$(1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(10-1) / Z21 1	Qu(10-1) / Z20 1
Energie	35,398	35,476
Incertitude totale	0,014	0,022
Incertitude statistique	0,0076	0,019
Incertitude systématique totale	0,011	0,011
Déplacement du masque	0,0033	0,0033
Intensité de la source	0,0080	0,0080
Distance cristal-détecteur	0,0050	0,0050
Rayon du cristal	0,0036	0,0036
Valeur du $2d$	0,0023	0,0023
Courbure du cristal	0,0010	0,0011
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>35,419</b>	
<b>Incertitude</b>	<b>0,012</b>	

**Tab. 1.10** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$ . Zxx désigne le nom du cristal.

SOUFRE		
$(1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(100) / Z10 3	Qu(100) / Z11 1
Energie	16,803	16,792
Incertitude totale	0,012	0,014
Incertitude statistique	0,0086	0,0115
Incertitude systématique totale	0,0079	0,0079
Déplacement du masque	0,0016	0,0015
Intensité de la source	0,0070	0,0070
Distance cristal-détecteur	0,0024	0,0024
Rayon du cristal	0,0017	0,0017
Valeur du $2d$	0,0013	0,0013
Courbure du cristal	0,0005	0,0005
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>16,7984</b>	
<b>Incertitude</b>	<b>0,0089</b>	

**Tab. 1.11** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$ . Zxx désigne le nom du cristal.

SOUFRE		
$(1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(100) / Z10 3	Qu(100) / Z11 1
Energie	18,384	18,397
Incertitude totale	0,025	0,034
Incertitude statistique	0,023	0,033
Incertitude systématique totale	0,0080	0,0080
Déplacement du masque	0,0017	0,0017
Intensité de la source	0,0070	0,0070
Distance cristal-détecteur	0,0026	0,0026
Rayon du cristal	0,0019	0,0019
Valeur du $2d$	0,0014	0,0014
Courbure du cristal	0,0006	0,0006
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>18,388</b>	
<b>Incertitude</b>	<b>0,020</b>	

**Tab. 1.12** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$  et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$ . Zxx désigne le nom du cristal.

SOUFRE		
Transition non identifiée #1 - $(1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(100) / $Z_{10}$ 3	Qu(100) / $Z_{11}$ 1
Energie	15,692	15,672
Incertitude totale	0,022	0,035
Incertitude statistique	0,020	0,034
Incertitude systématique totale	0,0078	0,0078
Déplacement du masque	0,0015	0,0014
Intensité de la source	0,0070	0,0070
Distance cristal-détecteur	0,0022	0,0022
Rayon du cristal	0,0016	0,0016
Valeur du $2d$	0,0012	0,0012
Courbure du cristal	0,0005	0,0005
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>15,686</b>	
<b>Incertitude</b>	<b>0,018</b>	

**Tab. 1.13** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition non identifiée #1 et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre.  $Z_{xx}$  désigne le nom du cristal.

SOUFRE		
Transition non identifiée #2 - $(1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$		
type / nom du cristal nombre de spectres	Qu(100) / $Z_{10}$ 3	Qu(100) / $Z_{11}$ 1
Energie	19,040	18,980
Incertitude totale	0,028	0,031
Incertitude statistique	0,027	0,030
Incertitude systématique totale	0,0081	0,0081
Déplacement du masque	0,0018	0,0017
Intensité de la source	0,0070	0,0070
Distance cristal-détecteur	0,0027	0,0027
Rayon du cristal	0,0020	0,0019
Valeur du $2d$	0,0015	0,0015
Courbure du cristal	0,0006	0,0006
<b>Moyenne pondérée</b>	<b>19,013</b>	
<b>Incertitude</b>	<b>0,021</b>	

**Tab. 1.14** – Résultats en eV avec le détail des incertitudes pour l'écart en énergie entre la transition non identifiée #2 et la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre.  $Z_{xx}$  désigne le nom du cristal.

Pour avoir les valeurs absolues des énergies de transitions que l'on a étudiées, il suffit d'ajouter aux valeurs données dans les tableaux 1.1 à 1.14 celles des transitions de référence (M1) correspondantes<sup>1</sup>, données dans le tableau 1.15. On obtient les valeurs

1. L'incertitude sur la valeur théorique de la raie de référence doit être ajoutée à celle de la raie étudiée.

Valeurs théoriques de la raie M1			
$1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$			
Elément	Argon	Soufre	Chlore
Energie	3104,1483	2430,3512	2756,8648
Incertitude	0,0005	0,0004	0,0004

**Tab. 1.15** – Valeurs théoriques en eV des énergies de la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  dans l'argon, le soufre et le chlore héliumoides issues de [ARTEMYEV ET AL. 2005], la référence que nous avons choisie pour convertir nos mesure relatives en mesures absolues.

recueillies dans le tableau 1.16.

Energies absolues des transitions		
Elément	Nom de la transition	Energie (incertitude)
ARGON	$1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$	3091,7759(38)
	$1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$	3114,1225(26)
	$1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$	3112,4511(26)
	$1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	3123,488(13)
	$1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	3126,292(12)
	$1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	3139,570(12)
SOUFRE	$1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$	2438,1058(35)
	$1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$	2437,1152(50)
	raie non identifiée #1	2446,037(19)
	$1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	2447,1495(93)
	$1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	2448,739(21)
	raie non identifiée#2	2449,364(21)
CHLORE	$1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$	2765,6774(31)
	$1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$	2764,3778(54)

**Tab. 1.16** – Résultats en eV pour les énergies des transitions étudiées.

### V-3 Comparaison des résultats aux autres valeurs expérimentales et aux valeurs théoriques

#### V-3-1 Graphiques

On compare sous forme de graphiques nos résultats aux autres valeurs expérimentales et aux valeurs théoriques récentes.

Nos mesures étant relatives, on a ajouté à nos résultats les valeurs des énergies de la transition de référence M1 issues de [ARTEMYEV ET AL. 2005] données dans 1.15 pour obtenir les énergies absolues données dans les graphiques.

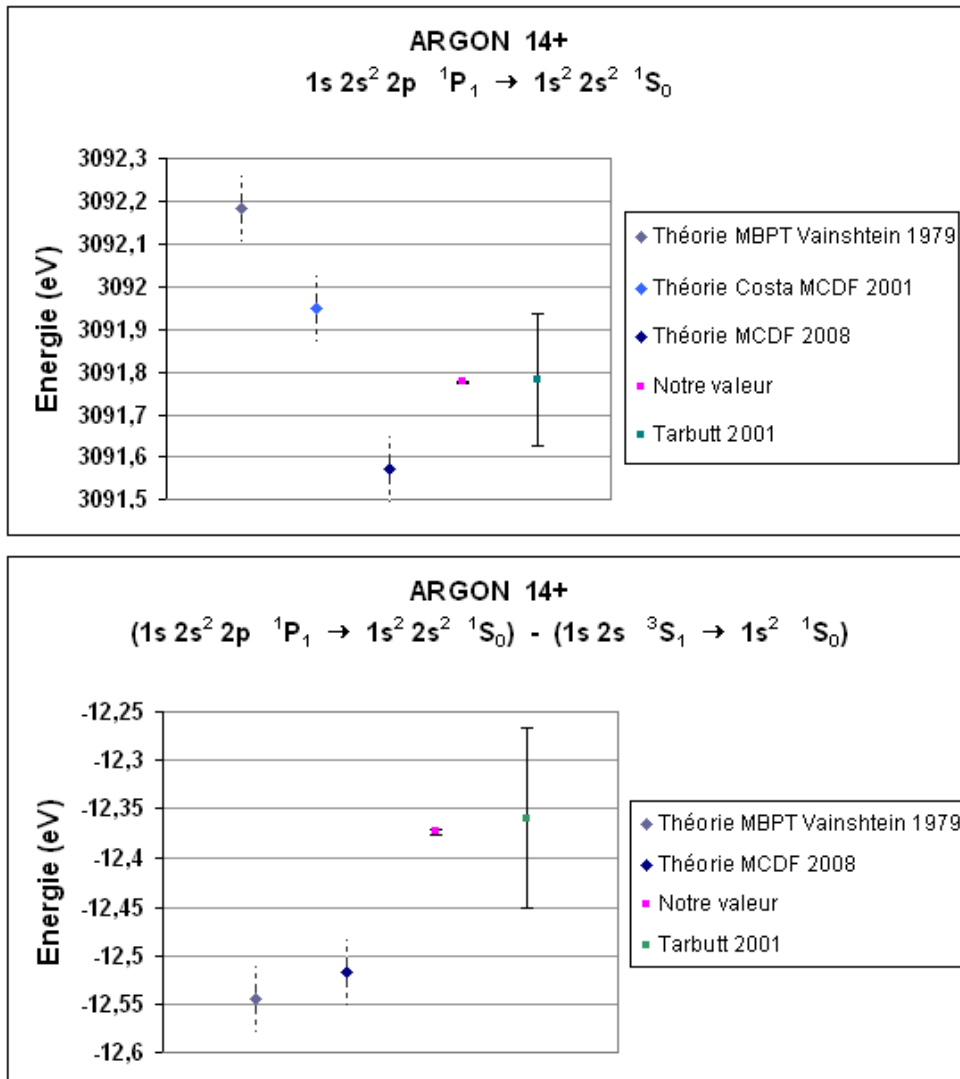


Fig. 1.45 – Comparaison graphique du résultat pour la transition  $1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$  de l'argon 14+ avec les valeurs théoriques [VAINSHTEIN and LISINA 1979 ; COSTA ET AL. 2001 ; INDELICATO 2008] et une autre valeur expérimentale [TARBUTT ET AL. 2001]. On a utilisé la valeur issue de [VAINSHTEIN and SAFRONOVA 1978] pour la transition M1 associée aux valeurs des transitions lithuïmoïdes issues [VAINSHTEIN and SAFRONOVA 1978]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

Dans les légendes des graphiques, on a associé certains sigles aux références théoriques. « MBPT » correspond à Many Body Perturbation Theory, « MCDF » correspond à Multi Configuration Dirac Fock. Lorsqu'aucun sigle n'est associé à une référence, il s'agit d'une méthode de calcul faisant appel à des méthodes mixtes d'électrodynamique quantique et de problème à N-corps. Dans tous les graphiques, les valeurs théoriques

sont à gauche de notre valeur, les valeurs expérimentales sont à droite.

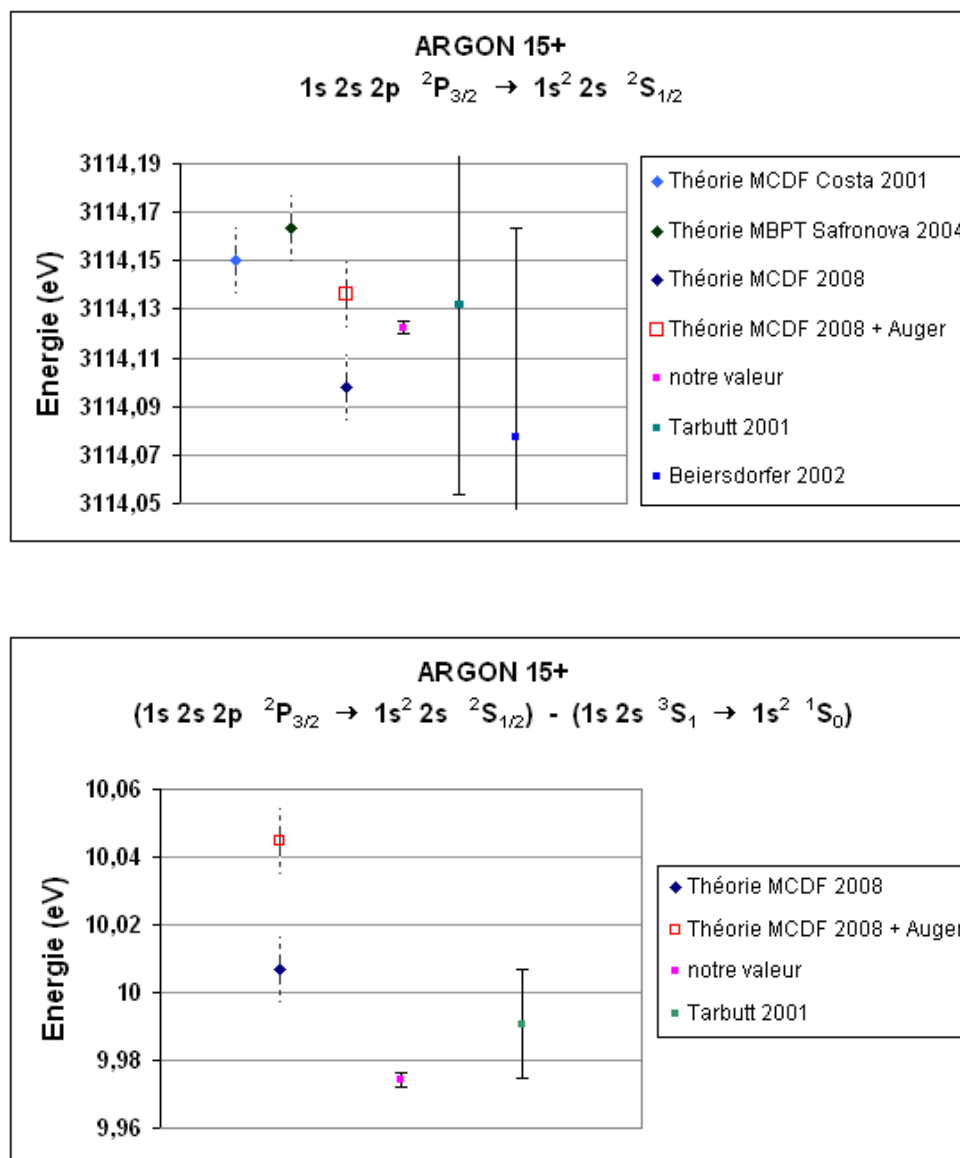


Fig. 1.46 – Comparaison graphique du résultat pour la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  de l'argon  $15^+$  avec les valeurs théoriques [COSTA ET AL. 2001 ; SAFRONOVA and SAFRONOVA 2004 ; INDELICATO 2008] et les autres valeurs expérimentales [TARBUTT ET AL. 2001 ; BEIERSDORFER ET AL. 2002]. La contribution due à l'effet Auger est issue de [LINDROTH 2009]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.



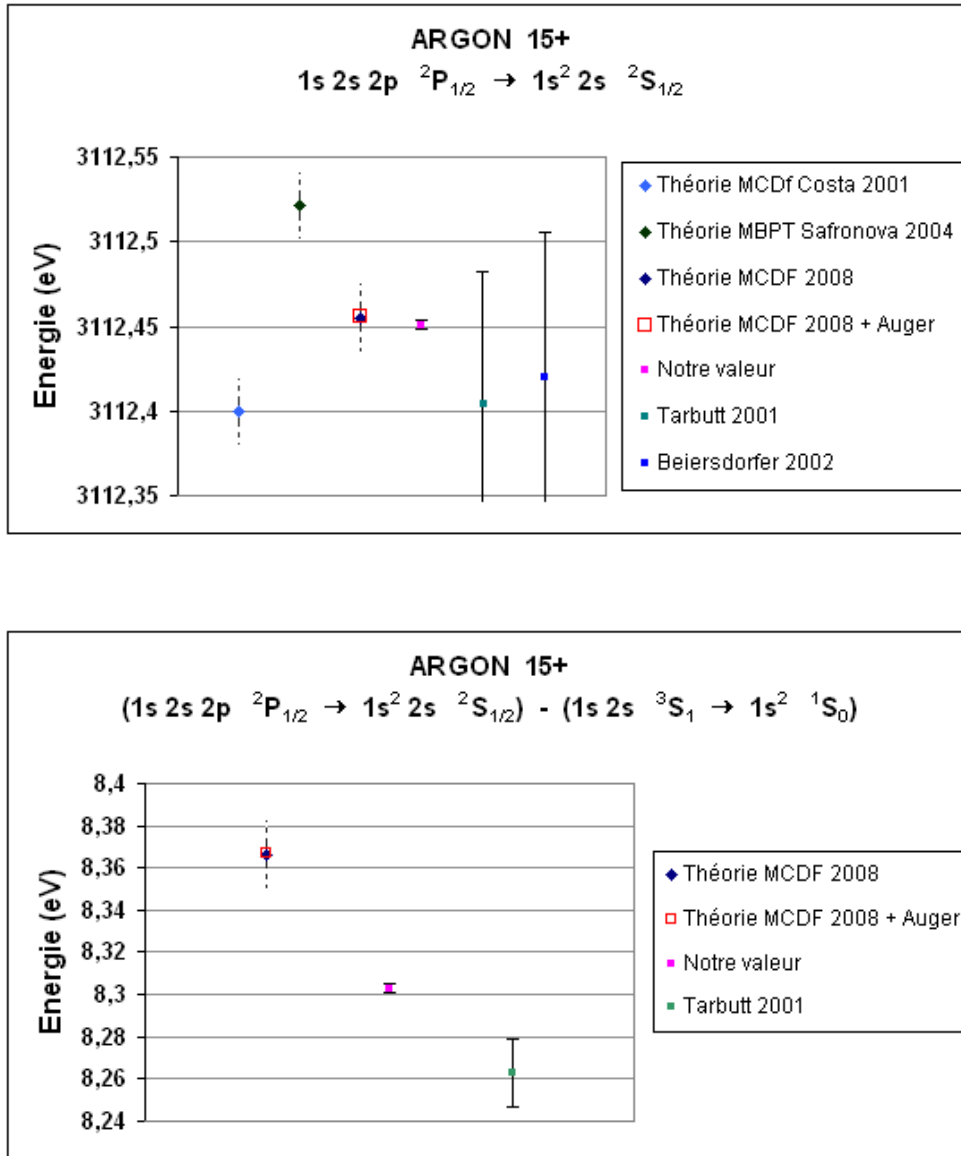


Fig. 1.47 – Comparaison graphique du résultat pour la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  de l'argon  $15^+$  avec les valeurs théoriques [COSTA ET AL. 2001 ; SAFRONOVA and SAFRONOVA 2004 ; INDELICATO 2008] et les autres valeurs expérimentales [TARBUTT ET AL. 2001 ; BEIERSDORFER ET AL. 2002]. La contribution due à l'effet Auger est issue de [LINDROTH 2009]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

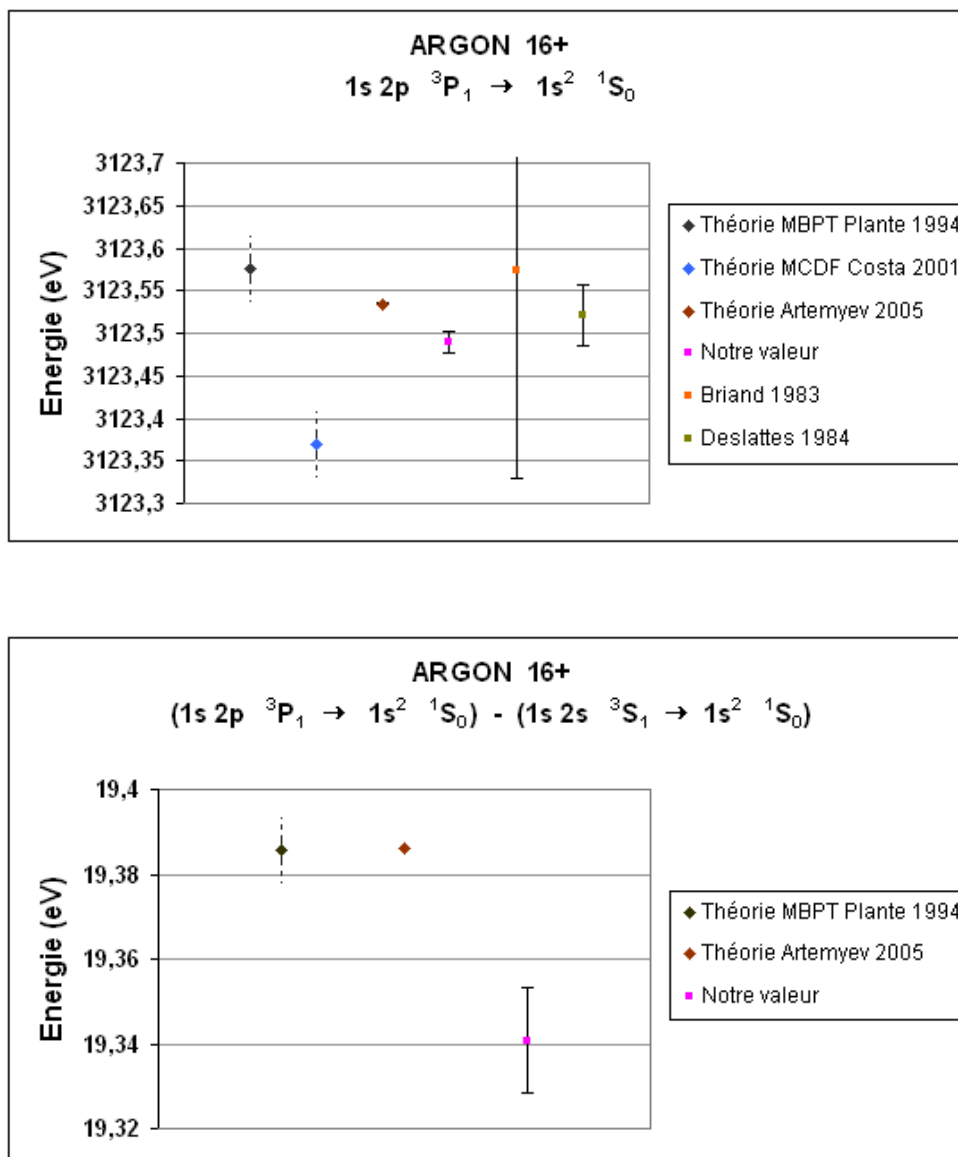


Fig. 1.48 – Comparaisons graphiques du résultat pour la transition  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$  avec les valeurs théoriques [PLANTE ET AL. 1994 ; COSTA ET AL. 2001 ; ARTEMYEV ET AL. 2005], et les autres valeurs expérimentales [BRIAND ET AL. 1983 ; DESLATTES ET AL. 1984]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

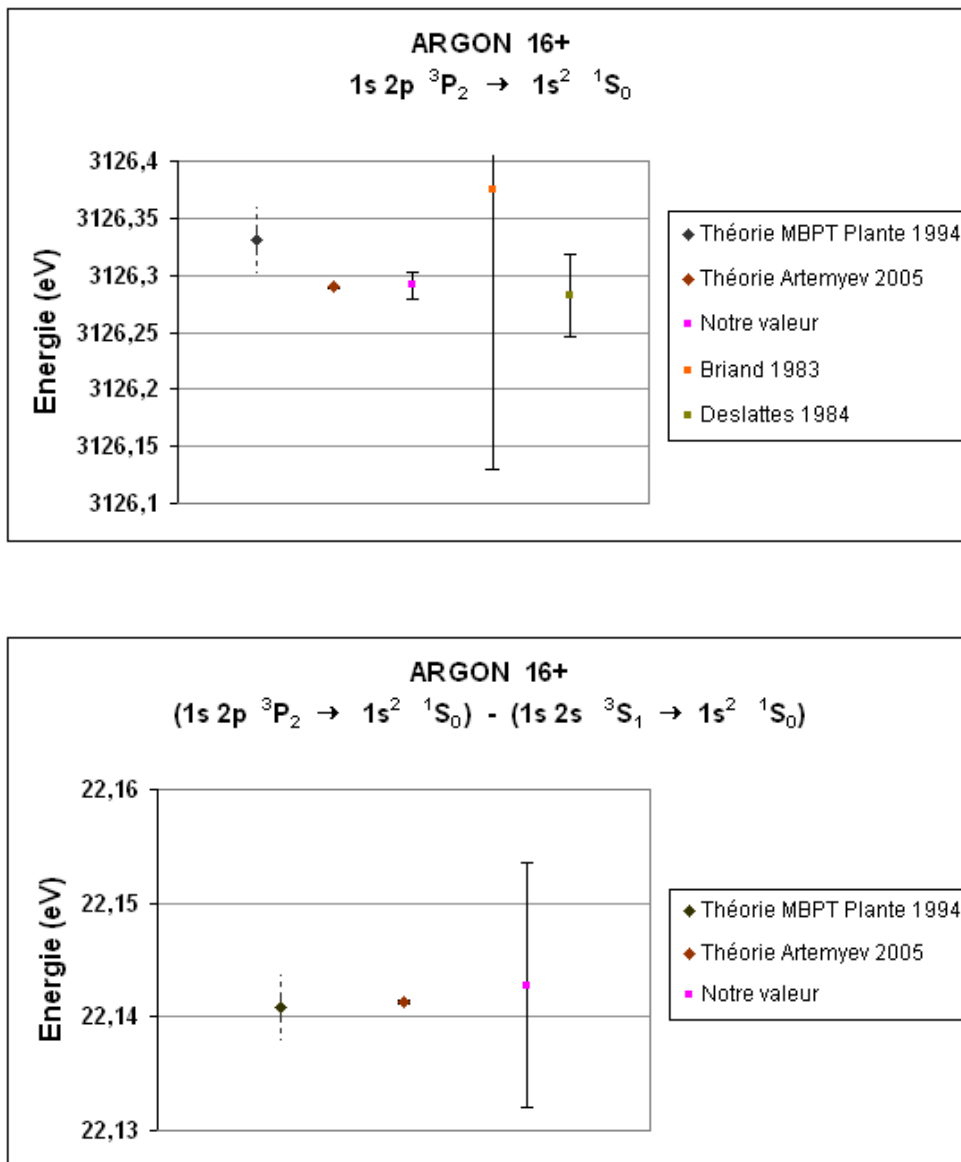


Fig. 1.49 – Comparaisons graphiques du résultat pour la transition  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$  avec les valeurs théoriques [PLANTE ET AL. 1994 ; ARTEMYEV ET AL. 2005] et les autres valeurs expérimentales [BRIAND ET AL. 1983 ; DESLATTES ET AL. 1984]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

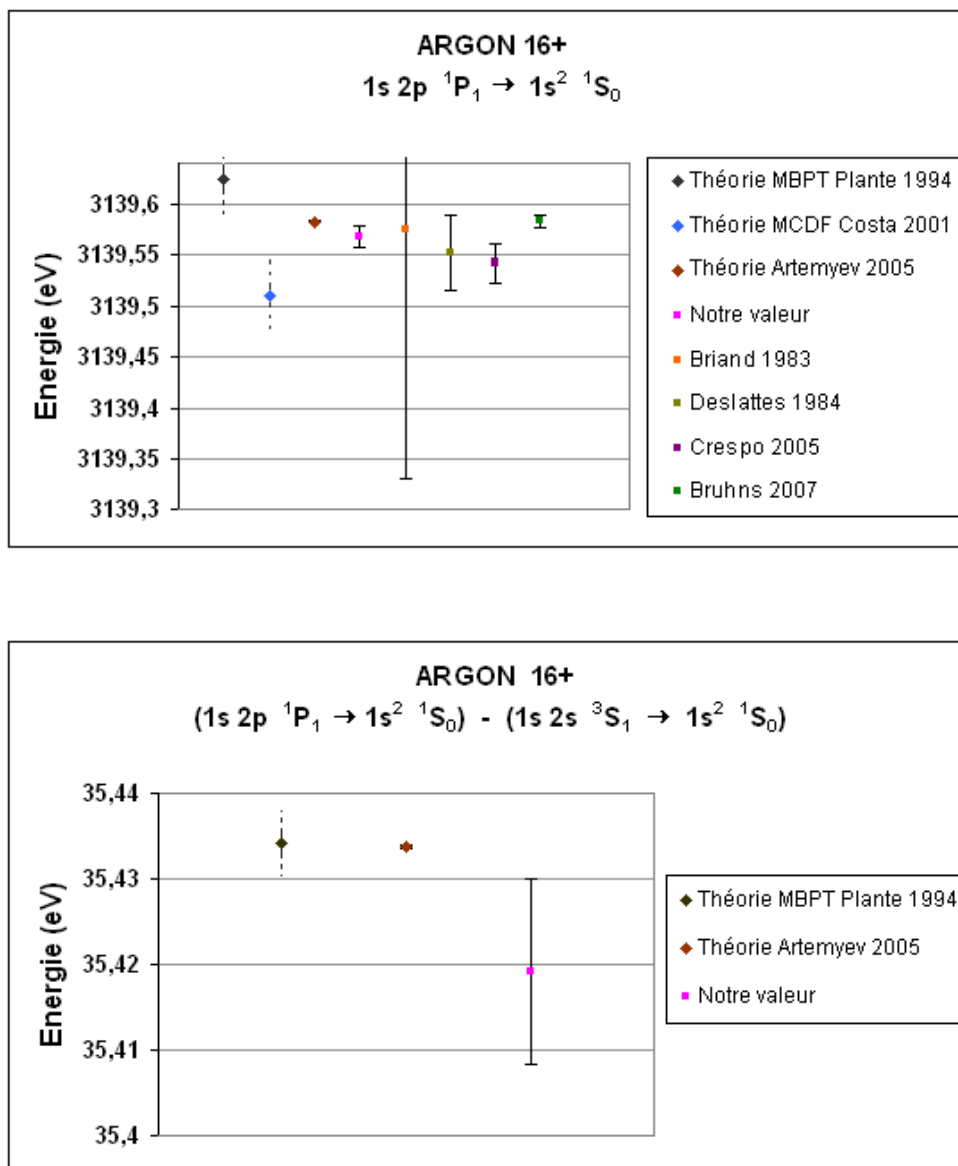


Fig. 1.50 – Comparaisons graphiques du résultat pour la transition  $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$  avec les valeurs théoriques [PLANTE ET AL. 1994 ; COSTA ET AL. 2001 ; ARTEMYEV ET AL. 2005] et les autres valeurs expérimentales [BRIAND ET AL. 1983 ; DESLATTES ET AL. 1984 ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA ET AL. 2005 ; BRUHNS ET AL. 2007]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

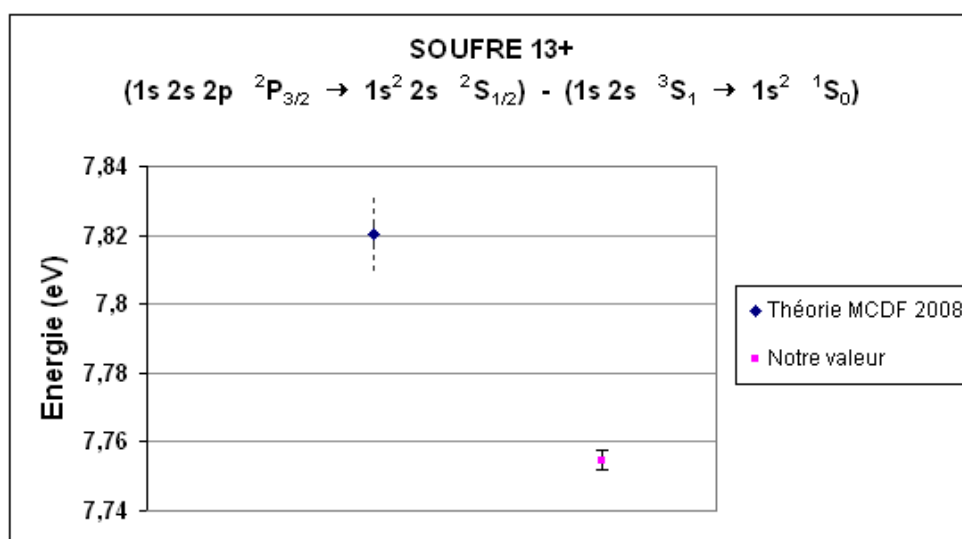
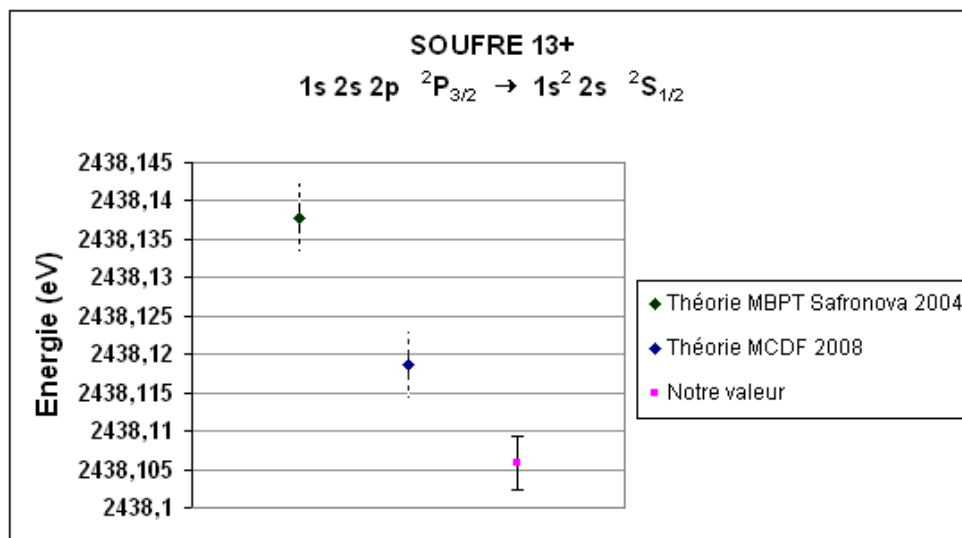


Fig. 1.51 – Comparaison graphique du résultat pour la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du soufre  $13^+$  avec les valeurs théoriques [SAFRONOVA and SAFRONOVA 2004 ; INDELICATO 2008]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

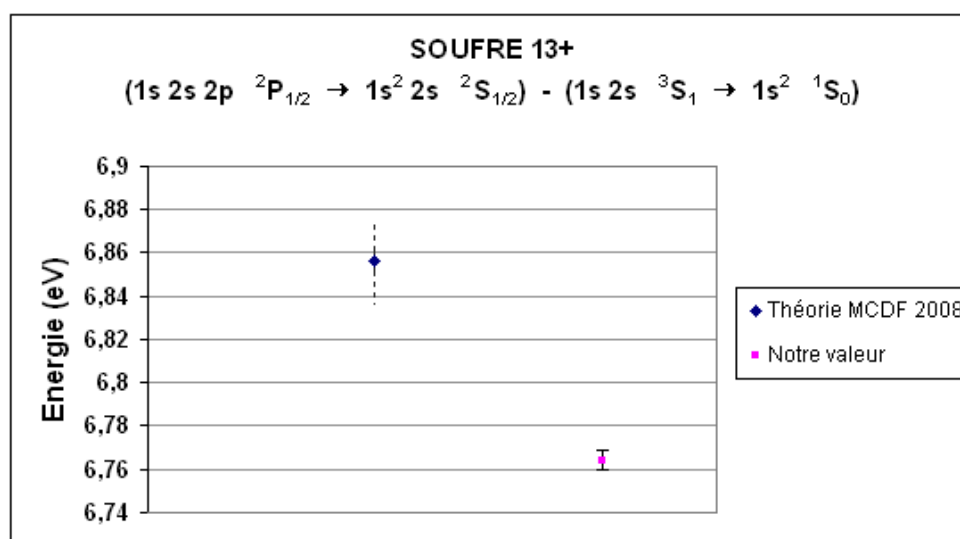
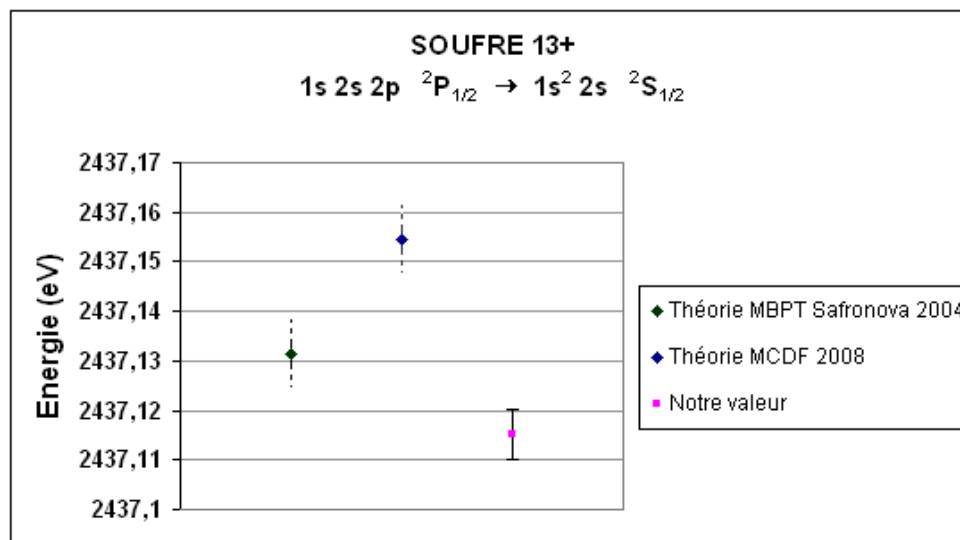


Fig. 1.52 – Comparaison graphique du résultat pour la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du soufre  $13^+$  avec les valeurs théoriques [SAFRONOVA and SAFRONOVA 2004 ; INDELICATO 2008]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $(1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}) - (1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

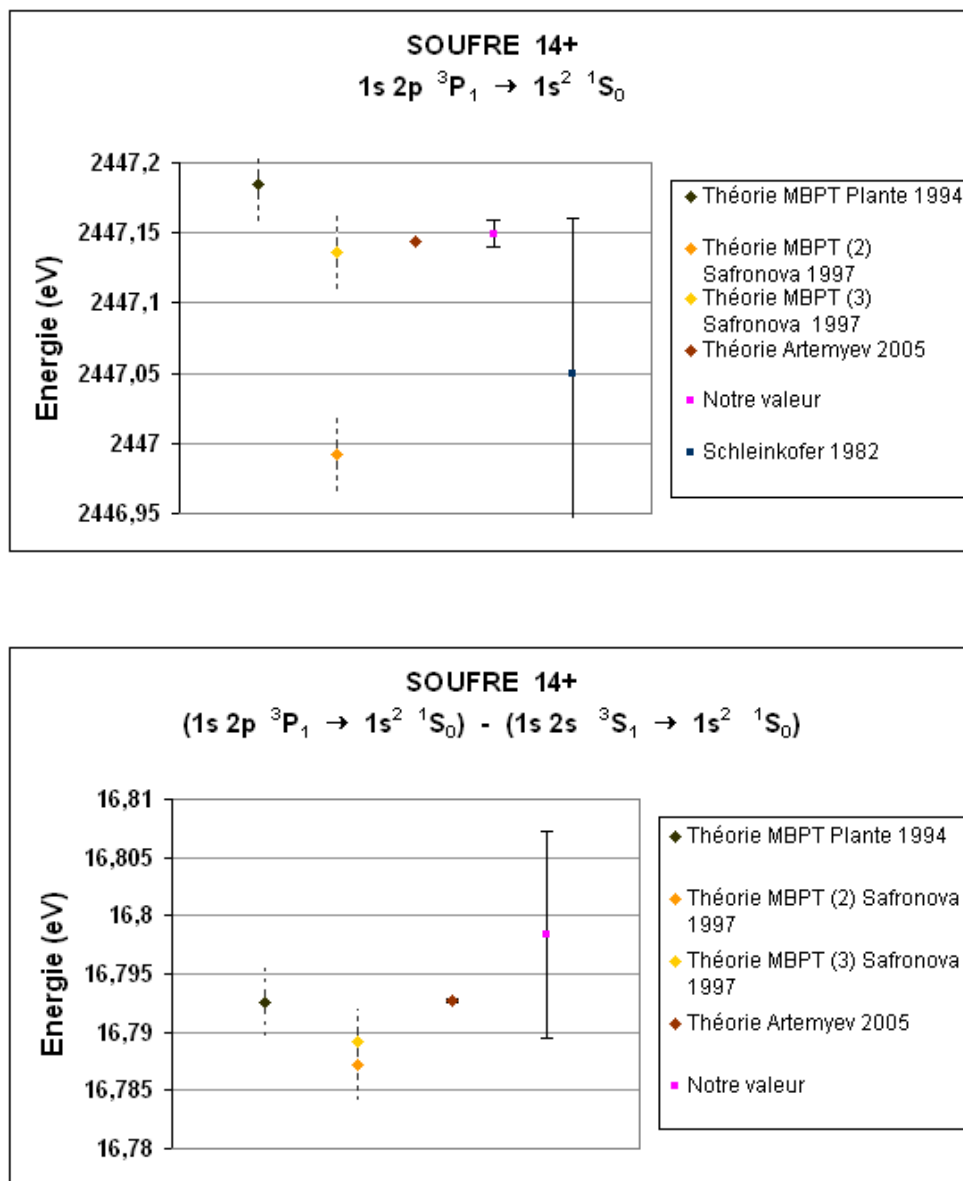


Fig. 1.53 – Comparaisons graphiques du résultat pour la transition  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$  avec les valeurs théoriques [PLANTE ET AL. 1994 ; KATO ET AL. 1997 ; ARTEMYEV ET AL. 2005] et une autre valeur expérimentale [SCHLEINKOFER ET AL. 1982]. Les valeurs « MBPT (2) Safronova 1997 » et « MBPT (3) Safronova 1997 » correspondent aux mêmes calculs, mais respectivement au 2<sup>nd</sup> et au 3<sup>ème</sup> ordres et sont issues de [KATO ET AL. 1997]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

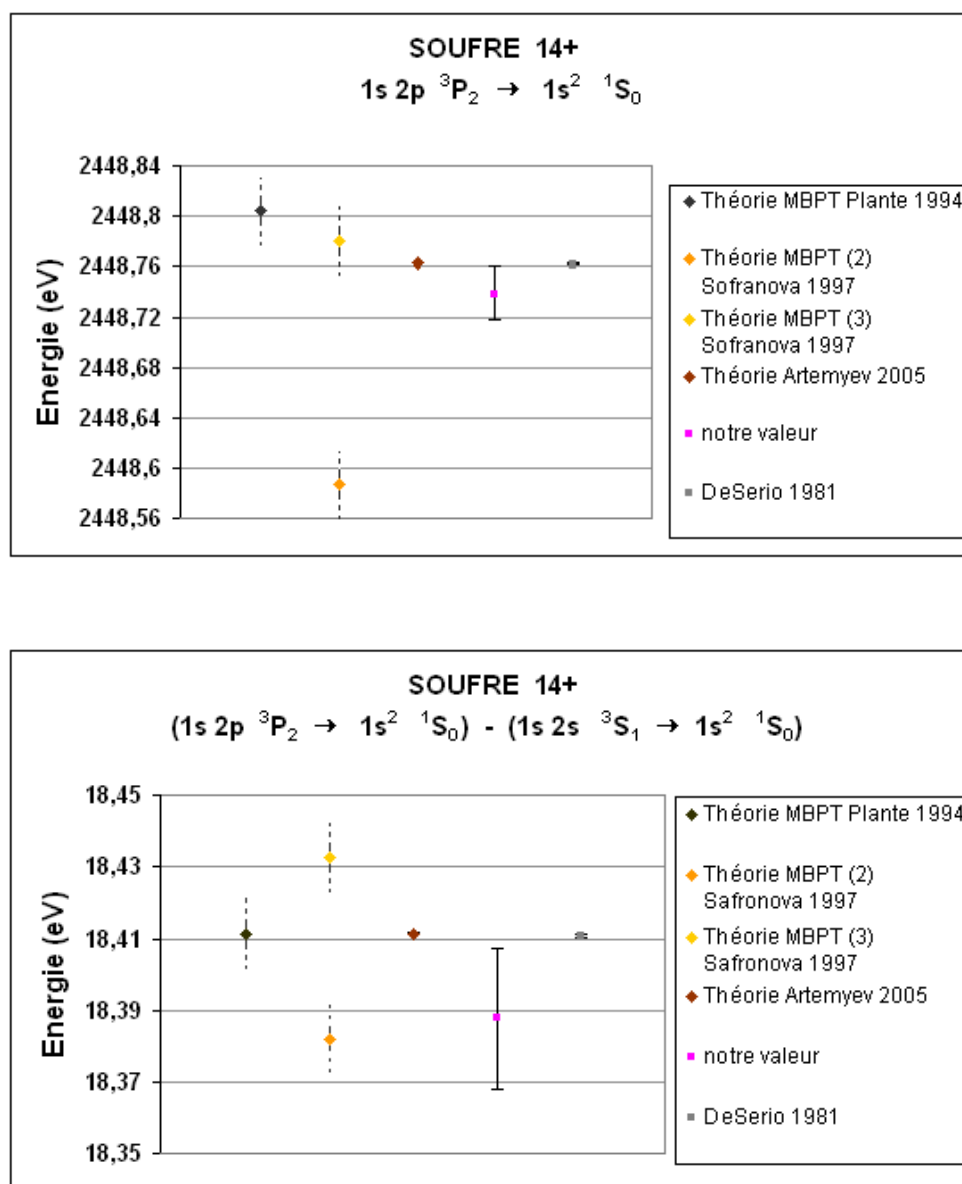


Fig. 1.54 – Comparaisons graphiques du résultat pour la transition  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre  $14^+$  avec les valeurs théoriques [PLANTE ET AL. 1994 ; KATO ET AL. 1997 ; ARTEMYEV ET AL. 2005] et une autre valeur expérimentale [DESERIO ET AL. 1981]. Cette dernière ne correspond pas à la mesure de la transition  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ , mais est déduite de la mesure de la transition  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^3S_1$ . Les valeurs « MBPT (2) Safranov 1997 » et « MBPT (3) Safranov 1997 » correspondent aux mêmes calculs, mais respectivement au 2<sup>nd</sup> et au 3<sup>ème</sup> ordres et sont issues de [KATO ET AL. 1997]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.



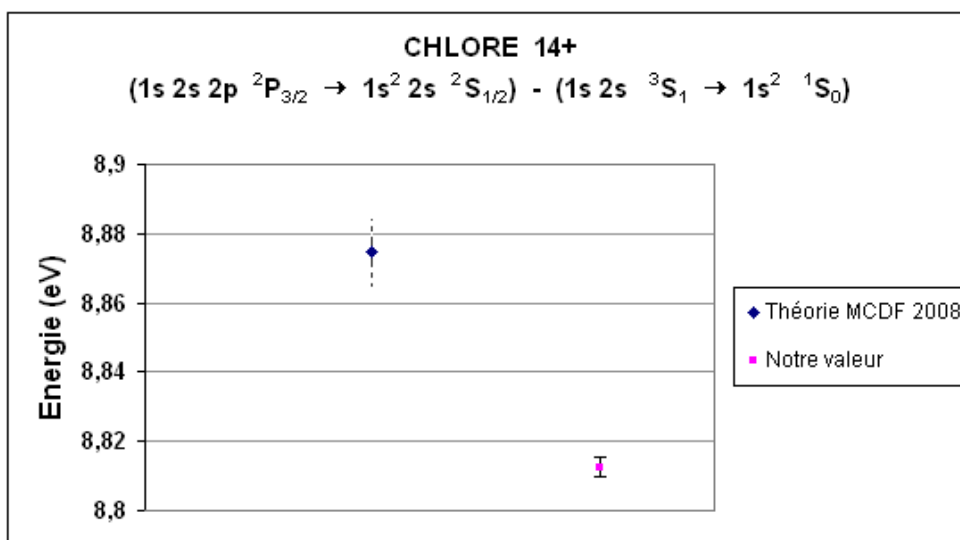
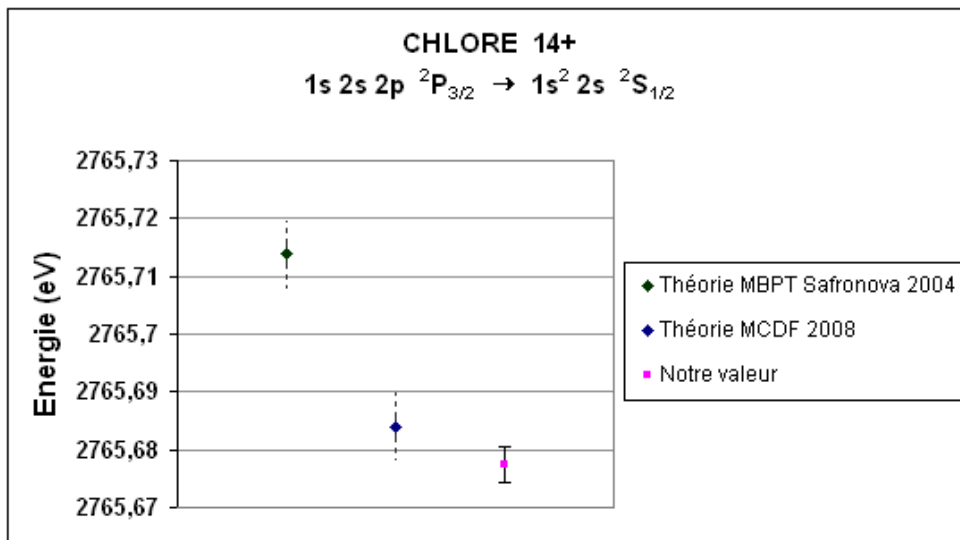


Fig. 1.55 – Comparaison graphique du résultat pour la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du chlore  $14^+$  avec les valeurs théoriques [SAFRONOVA and SAFRONOVA 2004 ; INDELICATO 2008]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $(1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2})$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

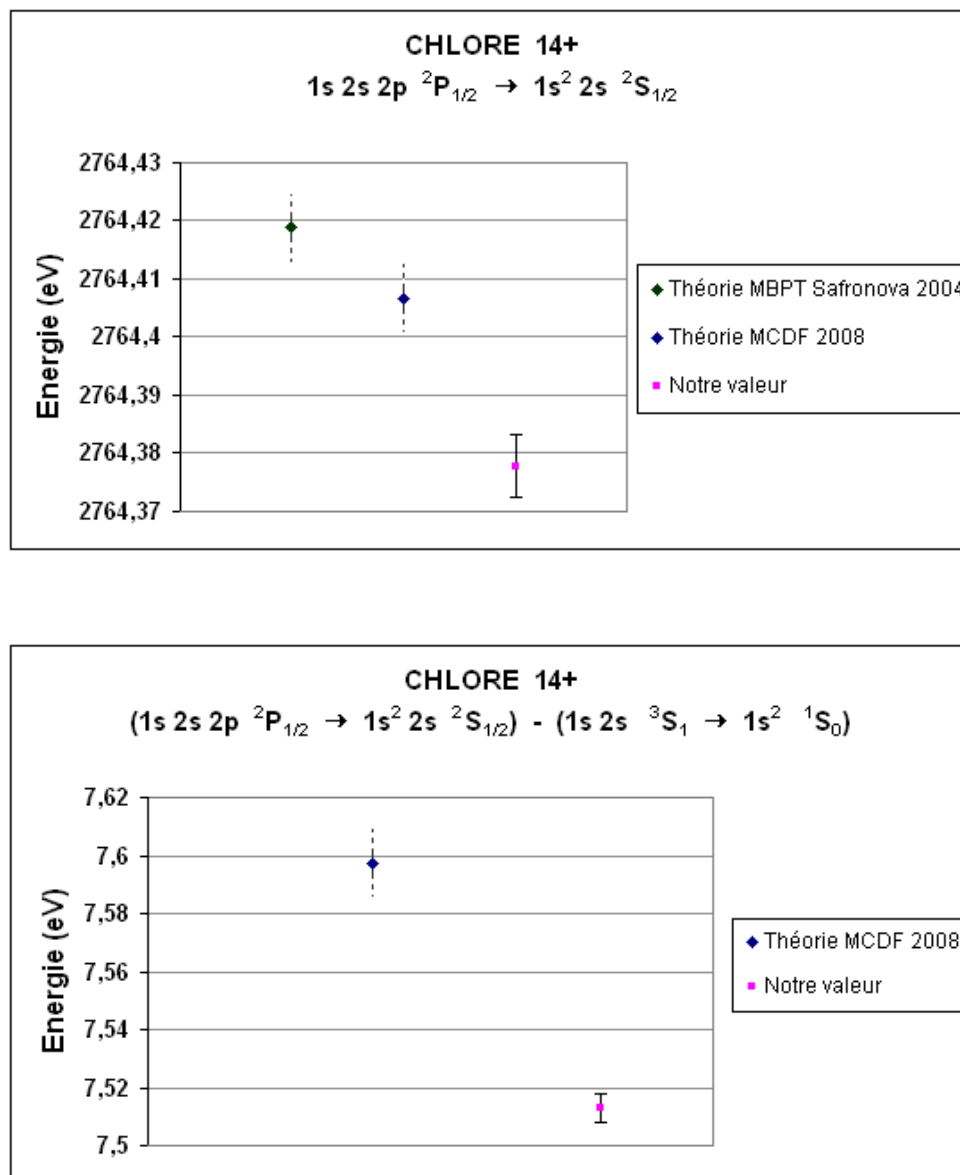


Fig. 1.56 – Comparaison graphique du résultat pour la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  du chlore  $14^+$  avec la valeur théorique [SAFRONOVA and SAFRONOVA 2004 ; INDELICATO 2008]. Sur la figure inférieure, on compare les écarts entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de référence. Les barres d'erreurs en pointillés indiquent que la valeur de l'incertitude n'est pas donnée.

### V-3-2 Discussion des résultats

#### V-3-2.a Transitions héliumoïdes

On constate que les valeurs que nous trouvons pour les transitions héliumoïdes sont en accord avec [ARTEMYEV ET AL. 2005], et en relativement bon accord avec les autres

valeurs théoriques moins récentes et les autres valeurs expérimentales (voir les figures 1.49, 1.50, 1.53, 1.54) bien qu'elles soient peu intenses par rapport aux autres (raies Li-like, Be-like) dans notre expérience. La transition  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon diffère cependant de 3,7 déviations standards de la valeur théorique (figure 1.48). On remarque que les écarts entre les transitions et la raie de référence que nous trouvons sont en accord avec le résultat de [PLANTE ET AL. 1994], mais que les énergies absolues sont en désaccord. Cela tient probablement au fait qu'une ou plusieurs corrections qui concernaient le niveau fondamental  $1s^2\ ^1S_0$  de l'ensemble des transitions héliumoïdes, dont la transition de référence  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  fait partie, diffèrent entre [PLANTE ET AL. 1994] et [ARTEMYEV ET AL. 2005]<sup>1</sup>.

D'une manière générale, on identifie pas de déviation systématique des valeurs que nous obtenons par rapport aux valeurs théoriques.

On peut remarquer que le résultat de [BRUHNS ET AL. 2007] pour la transition héliumoïde  $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon  $16^+$  est particulièrement précis. Dans l'expérience de [BRUHNS ET AL. 2007], une source dans le domaine visible est utilisée pour produire des raies se formant sur la caméra qui détecte les X, et qui servent de repères géométriques pour en déduire l'angle Bragg. La maîtrise des paramètres géométriques comme la prise en compte de l'angle de coupe du cristal permettent d'atteindre une précision de 1,9 ppm. Cependant la méthode d'analyse fait appel à la notion de barycentre de la raie, qui reste injustifiée à ce degré de précision. Ceci est d'autant plus critique que la mesure se fait par rapport à des raies du visible, n'ayant pas la même « forme » que les raies X.

### V-3-2.b Transitions lithiumoïdes

Nos résultats pour les transitions lithiumoïdes en énergies absolues sont en accord avec les autres expériences [TARBUTT ET AL. 2001 ; BEIERSDORFER ET AL. 2002].

Dans le cas de [TARBUTT ET AL. 2001], on dispose de l'écart en énergie des transitions lithiumoïdes avec la raie de référence. Ces valeurs ont été obtenues avec une source EBIT<sup>2</sup>, et un cristal courbé selon la géométrie de Johann, en mesurant l'écart d'énergie entre une transition de référence et la transition étudiée. La valeur théorique utilisée pour l'énergie de transition de référence, est issue de [DRAKE 1987], et diffère de seulement 7 meV de la nôtre. Compte tenu des incertitudes, les résultats finaux sont consistants avec les nôtres, et sont en bon accord<sup>3</sup>.

Cependant, il y a un désaccord avec les valeurs théoriques [INDELICATO 2008] pour les énergies absolues (voir la figure 1.58). On ne remarque pas de différence significative entre les désaccords concernant les transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et ceux concernant les transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ .

D'autre part, il existe aussi un désaccord entre la théorie [INDELICATO 2008] et nos résultats si l'on compare les énergies relatives, c'est-à-dire les valeurs pour les écarts

1. Rappelons que les valeurs des transitions  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  des trois éléments que nous avons utilisées pour convertir nos énergies relatives en énergies absolues sont issues de [ARTEMYEV ET AL. 2005].

2. Electron Beam Ion Trap

3. Néanmoins, la valeur issue de [TARBUTT ET AL. 2001] (1.47) pour l'écart entre la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et la transition  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon est un peu plus d'une déviation standard en dessous de la nôtre.

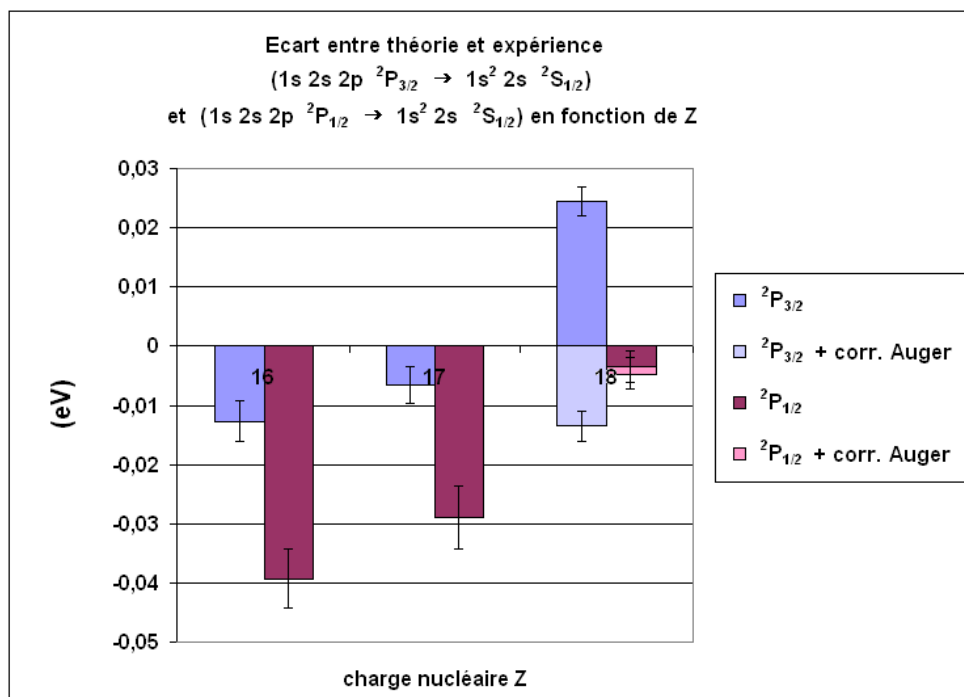


Fig. 1.57 – Ecart en eV entre la théorie [INDELICATO 2008] et nos résultats en fonction de la charge nucléaire Z pour les transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ .

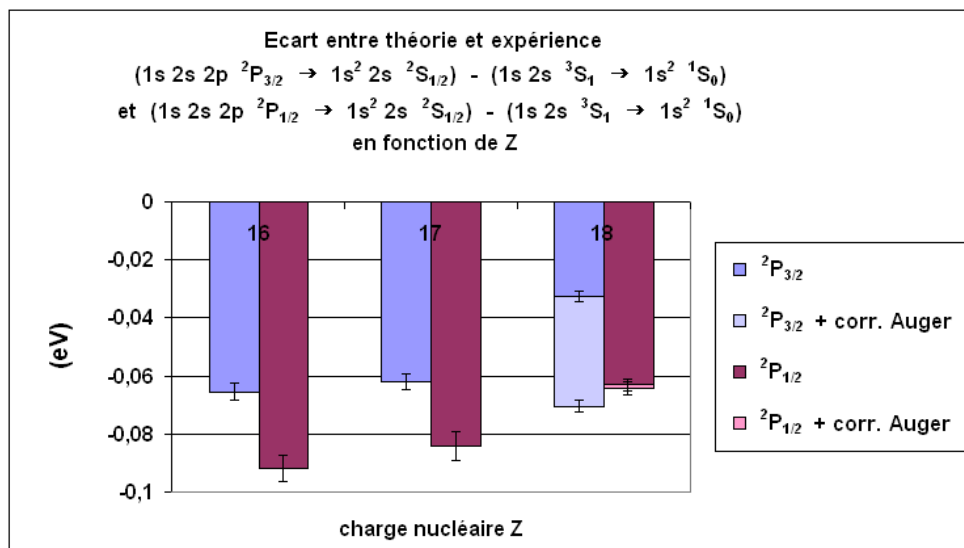


Fig. 1.58 – Ecart en eV entre la théorie et nos résultats pour les écarts d'énergie entre les transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  d'une part et les transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  d'autre part en fonction de la charge nucléaire Z.

avec les transitions de références  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  (voir la figure 1.57). En effet, afin de faire une comparaison pertinente, les valeurs théoriques pour les écarts entre les transitions lithiumoïdes et les transitions de référence  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  ont été obtenus en utilisant uniquement des valeurs issues de la même méthode de calcul [INDELICATO 2008].

Précisons que les énergies des transitions  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  issues de [ARTEMYEV ET AL. 2005], que nous utilisons pour convertir nos mesures relatives en énergies absolues, sont plus précises que les valeurs correspondantes issues de [INDELICATO 2008].

Le fait qu'il existe une différence importante entre les valeurs issue de [ARTEMYEV ET AL. 2005] et de [INDELICATO 2008] pour les transitions  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  laisse penser que certains effets concernant les ions à deux électrons ne sont pas gérés suffisamment précisément dans le cadre des calculs de [INDELICATO 2008]. Il semble donc que seule une comparaison des énergies relatives entre nos résultats et ceux de [INDELICATO 2008] soit pertinente. En effet, celle-ci permet d'identifier la contribution aux énergies des effets à trois électrons, qui ont lieu uniquement dans les lithiumoïdes, comme étant principalement responsables du désaccord observé pour les énergies relatives, étant donné que les effets à deux électrons doivent en principe partiellement s'annuler dans la différence.

Les tableaux 1.17 et 1.18 répertorient la liste des corrections aux énergies, parmi lesquelles on distingue les corrections sensibles aux effets à trois électrons, et qui expliqueraient les désaccords.

Les corrections concernées par les effets à trois électrons et qui sont suffisamment importantes pour expliquer le désaccord sont les corrections dues à : l'effet Auger, les corrélations entre états, les effets d'écrantage dans les calculs de QED. Il peut aussi s'agir d'autres contributions qui ne soient pas encore calculées.

Les corrections concernant l'effet Auger pour les transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  de l'argon viennent d'être calculées [LINDROTH 2009] mais ces résultats n'ont pas encore été publiés. On remarque sur la figure 1.58 qu'elles amplifient le désaccord notablement pour la transition  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  de l'argon.

Les effets d'écrantage peuvent contribuer au désaccord. La self-énergie écrantée par exemple, qui correspond à la boucle de self énergie d'un électron associée à l'échange de photons avec un autre électron, a été calculée au moyen d'approximations pour les transitions lithiumoïdes que nous avons étudiées.

Enfin, les calculs des corrélations entre états ne tiennent compte que des niveaux pour lequel  $n$  est inférieur ou égal à 5 dans le cas des transitions  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ , à 4 dans le cas de la transition  $1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$  de l'argon, à 4 dans le cas des transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ , et enfin à 5 dans le cas des transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$ .

Ces différents points théoriques sont abordés dans [INDELICATO ET AL. 2007].

### V-3-2.c Transition bérylliumoïde

Notre résultat est en accord avec la valeur expérimentale issue de [TARBUTT ET AL. 2001] (voir le § V-3-2.b pour plus de détails sur cette référence).

Contributions aux énergies de transitions en eV						
Contribution	1s 2s 2p	1s <sup>2</sup> 2s	1s 2s 2p → 1s <sup>2</sup> 2s	1s 2s	1s <sup>2</sup>	1s 2s → 1s <sup>2</sup>
	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> → <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	<sup>3</sup> S <sub>1</sub>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	<sup>3</sup> S <sub>1</sub> → <sup>1</sup> S <sub>0</sub>
Coulomb + PV	-6351,758	-9468,362	3116,604	-5444,050	-8549,851	3105,801
Int. mag. e <sup>-</sup> - e <sup>-</sup>	0,115	2,203	-2,088	0,024	2,013	-1,988
Retard int. e <sup>-</sup> - e <sup>-</sup>	0,058	-0,021	0,079	-0,025	0	-0,025
Corrélations	-0,875	-1,498	0,623	-0,055	-1,333	1,278
Effet Auger	0,038	0	0,038	0	0	0
Self-énergie	1,385	2,597	-1,212	1,380	2,434	-1,053
Ecrantage	-0,033	-0,123	0,089	-0,016	-0,091	0,075
PV 2 <sup>nd</sup> ordre	0,000	0,001	0,000	0,000	0,001	0,000
QED 2 <sup>nd</sup> ordre	-0,001	-0,002	0,001	-0,001	-0,002	0,001
Recul	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Total</b>	<b>-6351,110</b>	<b>-9465,205</b>	<b>3114,133</b>	<b>-5442,741</b>	<b>-8546,830</b>	<b>3104,089</b>

**Tab. 1.17** – Exemple des contributions en eV aux énergies des transitions  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon calculées par MCDF [INDELICATO 2008]. Les corrections en écriture sombre correspondent aux corrections susceptibles d'être responsables du désaccord observé avec nos résultats. « PV » correspond à « polarisation du vide », « Retard int. » correspond au terme de retard dans l'échange de photons entre électrons, et « Int. mag. » correspond aux interactions de spin et d'orbitales. Les valeurs de la correction due à l'effet Auger sont issues de [LINDROTH 2009].

Contributions aux énergies de transitions en eV			
Contribution	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup> P <sub>1</sub> →	1s 2s 2p <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> →	1s 2s 2p <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> →
	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> <sup>1</sup> S <sub>0</sub>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>
Coulomb + PV	-11,744	10,802	9,010
Int. magnétique e <sup>-</sup> - e <sup>-</sup>	-0,224	-0,100	-0,035
Retard int. e <sup>-</sup> - e <sup>-</sup>	0,105	0,103	0,095
Corrélations	-0,532	-0,655	-0,550
effet Auger	?	0,038	0,001
Self-énergie	-0,160	-0,159	-0,164
Ecrantage	0,037	0,014	0,009
PV 2 <sup>nd</sup> ordre	0,000	0,000	0,000
QED 2 <sup>nd</sup> ordre	0,000	0,000	0,000
Recul	0,000	0,000	0,000
<b>Total</b>	<b>-12,517</b>	<b>-10,045</b>	<b>-8,367</b>

**Tab. 1.18** – Exemple des contributions aux écarts en énergies entre des transitions bérylliumoïdes et lithiumoïdes et la raie de référence héliumoïde  $M1\ 1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon calculées par MCDF [INDELICATO 2008]. Les corrections en écriture sombre correspondent aux corrections susceptibles d'être responsables du désaccord observé avec nos résultats. « PV » correspond à « polarisation du vide », « Retard int. » correspond au terme de retard dans l'échange de photons entre électrons, et « Int. mag. » correspond aux interactions de spin et d'orbitales. Les valeurs de la correction due à l'effet Auger sont issues de [LINDROTH 2009].

Le désaccord entre notre résultat et la valeur théorique (environ 145 meV pour les écarts entre la transition et la référence) [INDELICATO 2008] peut être expliqué de la même manière que pour les transitions lithiumoïdes. Cependant, celui-ci est environ deux fois plus important que les désaccords constatés pour les transitions lithiumoïdes.

La contribution due à l'effet Auger n'a pas été calculée, dans le cas de la transition bérylliumoïde. En ce qui concerne les autres corrections, les arguments concernant les effets impliquant plusieurs électrons exposés dans le cas des lithiumoïdes restent valables pour la transition bérylliumoïde, mais ces effets sont d'autant plus importants dans ce cas étant donné qu'il y a non pas un mais deux électrons supplémentaires par rapport à la transition de référence.

---

## V-4 Améliorations à apporter à l'analyse et perspectives

### V-4-1 Implémentation de l'intensité de la source

Il apparaît indispensable d'effectuer des balayages de la source pendant les expériences, afin d'inclure sa répartition d'intensité dans l'analyse. Même s'il est possible d'obtenir de bons résultats avec cette méthode, on doit garder à l'esprit que le plasma subit de légères variations de forme et d'intensité au cours du temps. Cela laisse penser que le problème d'implémentation de la répartition d'intensité de la source pourrait devenir un facteur limitant si la précision de l'expérience s'accroît davantage. Il pourrait être envisagé d'extraire des spectres eux-mêmes, des informations sur la répartition d'intensité dans la source, car ils en contiennent en effet la signature.

### V-4-2 Remarques sur les fits : profils Lorentziens

La forme d'un profil de raie dépend de plusieurs facteurs : la largeur Lorentzienne naturelle (émission radiative, émission Auger), la fonction de réponse du système (notamment la fonction de réponse du cristal « parfait ») et l'élargissement Gaussien (imperfections des cristaux, effet Doppler). C'est la fonction de réponse du spectromètre qui est prépondérante dans notre cas. Par exemple, la largeur naturelle de la transition  $M1\ 1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  est négligeable ( $\simeq 1\text{ neV}$ ) par rapport à la largeur totale des raies expérimentales (de l'ordre de 0,5 eV). On ne retrouve quasiment pas le caractère Lorentzien des raies aux largeurs naturelles les plus petites (raies héliumoïdes non sujettes à l'effet Auger) dans les profils des spectres expérimentaux. Par contre, celui-ci devient conséquent pour les transitions des ions à plus de deux électrons, de largeur Lorentzienne plus importante.

Afin d'améliorer l'analyse, on a modifié le programme d'ajustement de courbes où les profils de raies simulés sont convolués par une Lorentzienne de largeur ajustable. L'élargissement Gaussien qui est la conséquence des imperfections du cristal et de l'effet Doppler et qui est supposé être le même pour l'ensemble des raies d'un même spectre, serait alors déterminé [COVITA 2008] à l'aide d'une raie dont la transition a une largeur naturelle (Lorentzienne) quasiment nulle, comme par exemple la transition  $M1\ 1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ . L'élargissement Gaussien ainsi déterminé pourrait être appliqué à l'ensemble des raies simulées avant la procédure d'ajustement de courbes.

La procédure utilisant la détermination de la largeur Lorentzienne à l'aide de l'ajustement de courbes a déjà été testée. Elle donne le même résultat en terme d'énergie que l'autre méthode (les différences constatées au niveau des valeurs des énergies des transitions sont négligeables par rapport à l'incertitude).

Cette amélioration permettra de fournir les largeurs naturelles des transitions, pour entre autre l'étude de l'effet Auger.

### V-4-3 Calcul de la correction due à la courbure des cristaux

La théorie permettant de déterminer la correction due à la courbure des cristaux doit être étudiée. La correction aux énergies dépend du coefficient de Poisson (voir la formule 1.5), qui dépend de la matrice de déformation spécifique au type de cristal utilisé.

---

## V-5 Conclusion

Nous avons introduit une nouvelle méthode d'analyse de spectres, utilisant uniquement la simulation pour établir le lien entre raie spectrale et énergie. Cette méthode très robuste nous a permis de trouver 14 énergies pour diverses transitions d'ions à 2, 3 ou 4 électrons avec des précisions allant de 1 ou 2 ppm pour les raies les plus intenses, à 9 ppm pour les moins intenses. Certaines de ces transitions n'avaient jamais été mesurées. Ces valeurs expérimentales, parmi les plus précises au monde, constituent des critères d'évaluation de la précision des prédictions théoriques, notamment dans le cas des ions à plus de deux électrons, où la prise en compte de certains effets dus à la multiplicité des électrons restent à perfectionner. D'autre part, de nombreuses autres transitions présentes sur les spectres acquis pendant l'expérience sont sur le point d'être analysées. Les progrès accomplis peuvent d'autre part être mis à profit dans le cadre de l'étude des atomes exotiques (voir le chapitre 3) qui utilise le même spectromètre.





## Chapitre 2

---

---

# Conception d'un spectromètre X à deux cristaux plans pour la mesure de transitions atomiques d'ions très chargés

---

## I Introduction, objectifs scientifiques

---

La mise en place du spectromètre à deux cristaux plans sur la source d'ions ECR située au Laboratoire Kastler Brossel a essentiellement pour but la réalisation de mesures de qualité métrologique de transitions atomiques ayant lieu dans des ions à 2, 3, 4 électrons et ayant une charge nucléaire moyenne (quelques dizaines de charges) comme par exemple l'argon, le chlore ou le soufre. Cela constitue une des nouveautés instaurées par cette expérience, car jusqu'à présent, seules des sources constituées de tubes à rayons X haute puissance ont été associées à un tel spectromètre.

Contrairement au spectromètre décrit dans le chapitre 1, le spectromètre à deux cristaux plans a la propriété de mesurer les énergies de manière absolue<sup>1</sup>, car les spectres obtenus présentent une dispersion en énergie dépendant uniquement de l'angle absolu formé par les cristaux. La plus grande part de travail consiste donc à maîtriser les paramètres géométriques au niveau de la conception, de la mesure et de l'analyse. La précision minimum visée est de l'ordre du ppm sur les valeurs des énergies.

Pour la plupart, ces mesures constitueront les premières valeurs expérimentales obtenues pour ces ions très chargés.

---

1. C'est-à-dire sans calibration des énergies à l'aide d'une raie de référence.

## II Principe fondamental du spectromètre

Ce type de spectromètre a été construit pour la première fois en 1917 par A. Compton [COMPTON 1917] où étaient utilisés un cristal de chlorure de sodium et un autre de calcite. L'idée de positionner les cristaux en *mode parallèle* (voir II-2-2), fut exploitée par B. Davis et W. Stempel en 1921 [DAVIS and STEMPEL 1921]. Le *mode antiparallèle* (voir II-2-1) dispersif fut pour la première fois utilisé indépendamment par B. Davis [DAVIS and PURKS 1927] et W. Ehrenberg en 1927 [EHRENBERG and MARK 1927 ; EHRENBERG and SUSICH 1927]. Ce spectromètre fut ensuite exploité dans les années trente entre autre par S. Allison [ALLISON 1932], L. Parratt [PARRATT 1932] ou encore J. Bearden [BEARDEN 1933].

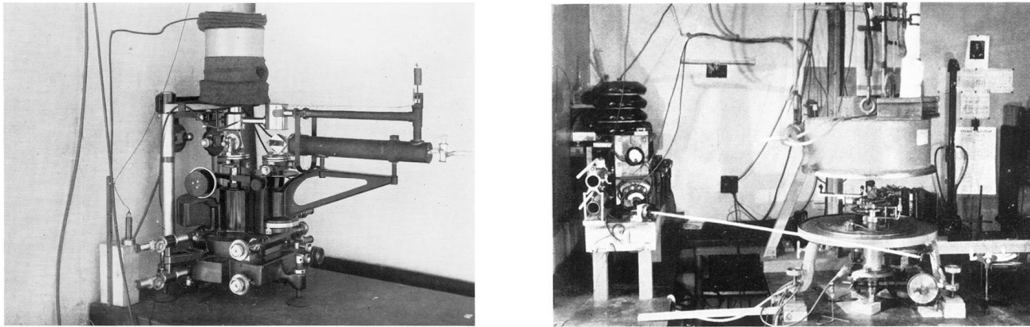


Fig. 2.1 – Photographies de deux des premiers spectromètres à deux cristaux plans datant de 1932. La photographie de gauche est tirée de [ALLISON 1932] et représente le spectromètre utilisé par S. Allison. Celle droite est tirée de [PARRATT 1932] et représente le spectromètre utilisé par L. Parratt.

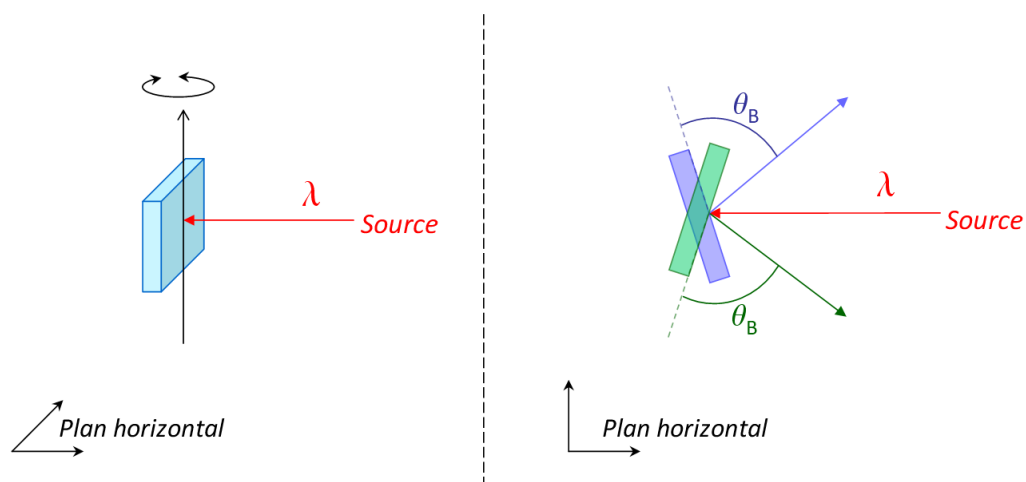
Depuis, ce type de spectromètre a été utilisé dans de nombreux contextes [BEARDEN ET AL. 1964 ; HENINS and BEARDEN 1964 ; DESLATTES 1967 ; BEARDEN and THOMSEN 1971 ; DESLATTES ET AL. 1980 ; KESSLER ET AL. 1982].

### II-1 Loi de Bragg

Comme on l'a déjà vu au chapitre 1, l'utilisation des cristaux permet de réfléchir les rayons X de manière dispersive car il existe une relation entre la direction des rayons réfléchis par rapport aux plans cristallins et leur énergie. Cette relation est appelée *loi de Bragg*<sup>1</sup> (1.1). Rappelons toutefois que la fonction de réponse d'un cristal réel n'est jamais une fonction delta de Dirac comme l'affirme la loi de Bragg, mais un pic de largeur petite (quelques centaines de  $\mu\text{rad}$ ). Pour simplifier, on va au cours de cette section négliger la largeur de cette fonction de réponse.

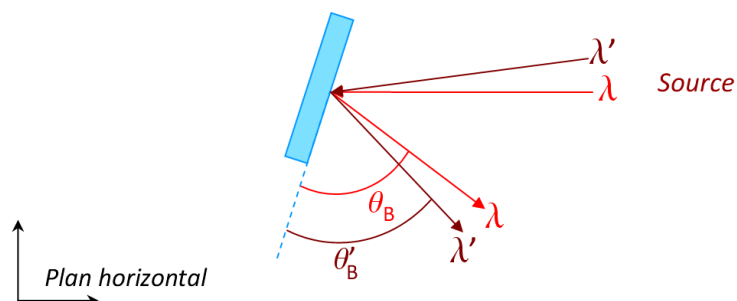
1. Voir le chapitre 1, section II-1-1 pour plus de détails.

Imaginons une source directionnelle, se propageant le long du plan horizontal, et un cristal plan dont la normale à la surface est dans ce même plan. La découpe du cristal est telle que sa surface optique est parallèle aux plans cristallins. Les rayons X ne sont réfléchis que pour deux orientations du cristal, comme cela est illustré par la figure 2.2.



**Fig. 2.2** – Les rayons de longueur d'onde  $\lambda$  sont réfléchis par le cristal lorsque l'angle d'incidence vérifie la loi de Bragg. Pour la configuration ici illustrée où les rayons se propagent le long du plan horizontal et où le cristal peut tourner autour de l'axe vertical, on trouve deux solutions pour sa position.

En pratique, on étudie des sources émettant des rayons X produits par un plasma au sein duquel ont lieu de multiples transitions atomiques d'énergies différentes. Ces sources ont une certaine extension spatiale. Il y a donc la possibilité d'y avoir plusieurs longueurs d'ondes réfléchies pour une orientation du cristal donnée comme cela est illustré par la figure 2.3.



**Fig. 2.3** – Avec une source étendue (mais dont les rayons se propagent toujours le long du plan horizontal), les rayons de longueurs d'ondes  $\lambda$  et  $\lambda'$  peuvent être réfléchis pour une même orientation du cristal.

## II-2 Association de deux cristaux

### II-2-1 Configuration *antiparallèle* des cristaux : mode dispersif

Pour plus de simplicité, on va se limiter dans les démonstrations qui suivent au cas d'une source émettant des rayons appartenant au plan horizontal, désigné comme le plan de réflexion.

Grâce à l'introduction d'un second cristal positionné comme sur la figure 2.4 qui vient recueillir les rayons réfléchis par le premier cristal, on dispose d'un système dont la dispersion en énergie dépend de l'angle formé entre les deux cristaux. En effet, pour une orientation donnée du premier cristal par rapport à la source, le second cristal ne réfléchira à son tour que des rayons ayant tous la même longueur d'onde (voir le schéma 1 de la figure 2.4), la valeur de celle-ci dépendant de l'orientation du second cristal par rapport au premier. On peut donc connaître la longueur d'onde des rayons réfléchis à partir de l'angle formé par les cristaux.

Enfin, pour obtenir le spectre d'émission du plasma, c'est-à-dire un histogramme des transitions, on fait pivoter le second cristal et l'on compte à l'aide d'un détecteur la quantité de rayons réfléchis par le système par unité de temps en fonction de l'angle du second cristal par rapport au premier. Le principe est illustrée par la figure 2.4.

### II-2-2 Configuration *parallèle* des cristaux : détermination de l'angle absolu formé par les cristaux

La mesure étant directement relié à l'angle formé par les cristaux, il faut pouvoir le connaître le plus précisément possible. On va donc chercher à connaître l'orientation absolue des cristaux l'un par rapport à l'autre. Pour cela, on utilise le fait que les rayons peuvent aussi être réfléchis par le second cristal lorsque celui-ci est parallèle au premier : voir la figure 2.5.

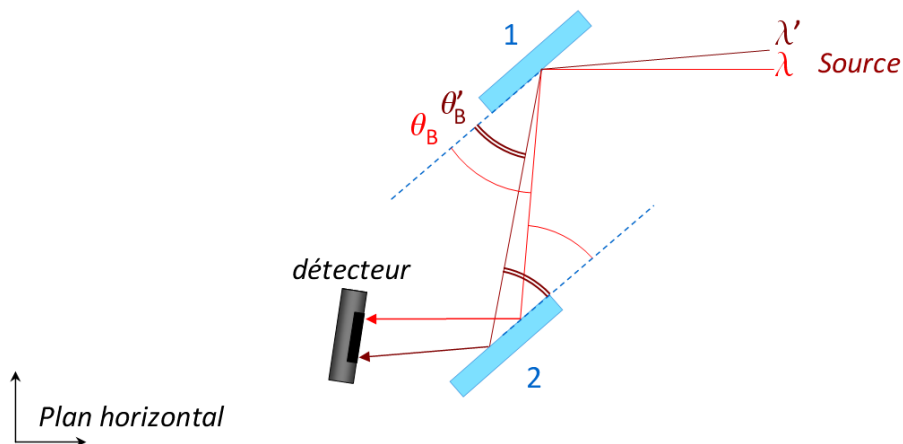
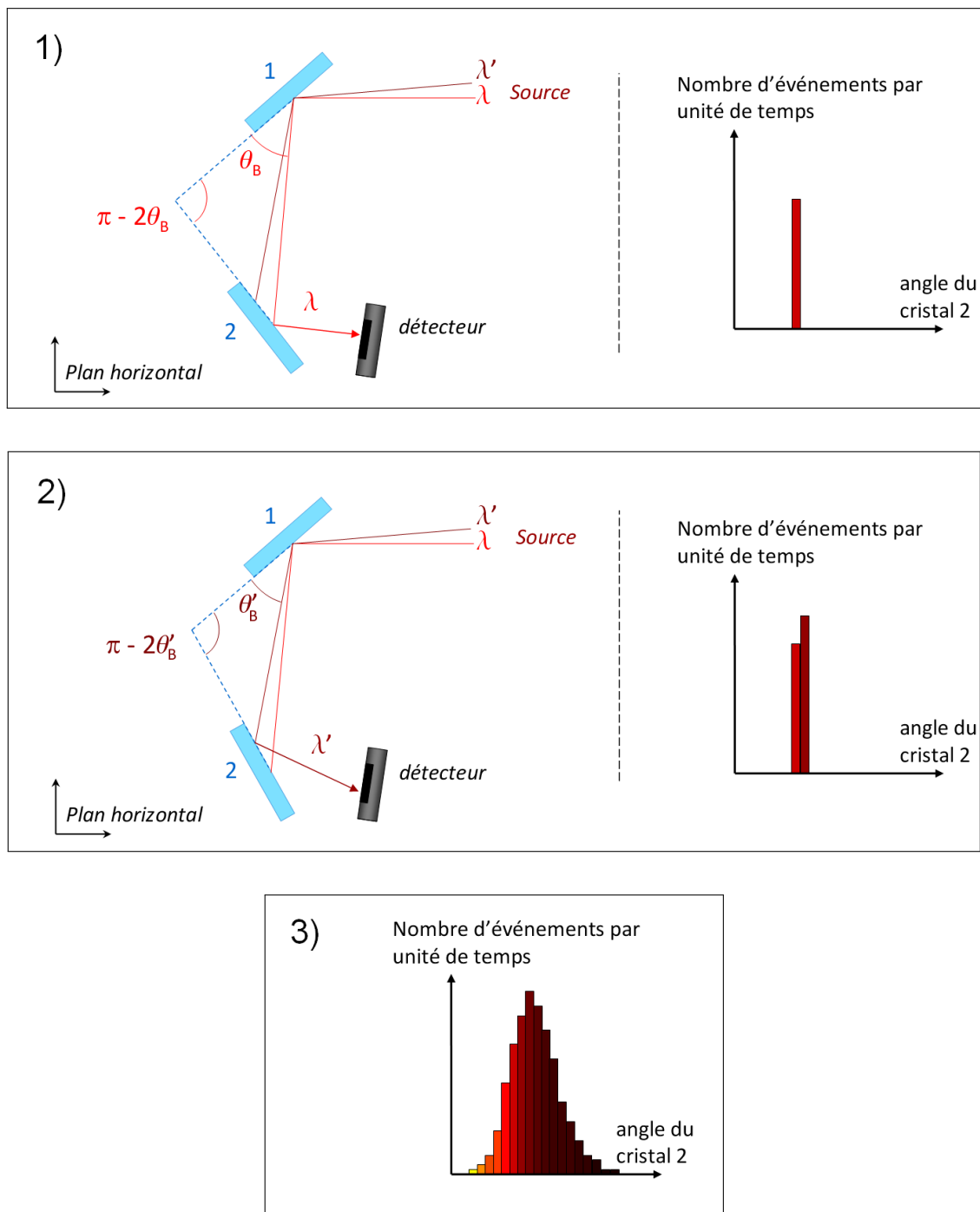


Fig. 2.5 – Configuration parallèle du spectromètre à deux cristaux plans. Cette configuration permet de connaître l'angle absolu que forment les cristaux.

## II Principe fondamental du spectromètre



**Fig. 2.4** – Principe du spectromètre à deux cristaux plans. Le cristal 2 ne réfléchit les rayons que pour une seule valeur de longueur d'onde, qui est fonction de l'angle formé par les deux cristaux. En 1), seule la longueur d'onde  $\lambda$  est réfléchi. En 2), seule la longueur d'onde  $\lambda'$  est réfléchi. Pour obtenir un spectre, on fait pivoter le second cristal. Pour chaque position du cristal on enregistre le nombre d'événements détectés par unité de temps. On obtient alors l'histogramme 3) qui représente une raie de transition.

Pour une telle configuration tous les rayons réfléchis par le premier cristal le sont aussi par le second, quelles que soient leurs longueurs d'ondes. La quantité de rayons X détectés en fonction de l'angle formé par les cristaux est donnée par la fonction de réponse du système centrée sur  $180^\circ$ , qui est essentiellement donnée par la convolution des fonctions de réponses de chaque cristal, chacune d'une largeur de quelques  $\mu\text{rad}$  environ.

Outre l'aspect pratique, cette méthode a l'avantage de ne pas mesurer l'angle relatif des surfaces optiques des cristaux, mais bien l'angle relatif des plans cristallins. En effet, les cristaux peuvent avoir un angle de coupe, c'est-à-dire que leur surface optique peut ne pas être parallèle aux plans cristallins.

### II-2-3 Avantages du spectromètre à deux cristaux plans

Nous venons de voir que l'association des deux cristaux permet de réaliser des mesures absolues des énergies, sans utiliser de transition de calibration. La calibration est directement donnée par l'espace interréticulaire des cristaux utilisés, mieux connu que les valeurs des énergies des transitions qui servent d'habitude à une calibration. Néanmoins, la réalisation des mesures devient plus délicate que pour des mesures relatives, nous allons le voir dans la section suivante, car l'on ne mesure pas l'écart entre deux énergies proches, mais directement l'énergie. On ne profitera donc pas du fait que les incertitudes sont multipliées par un facteur  $\Delta E$  correspondant à l'écart entre la référence et la mesure, comme se serait le cas avec une mesure relative. La maîtrise des paramètres géométriques du spectromètre devient d'autant plus déterminante pour la précision des mesures.

---

## III Exploitation des données

---

### III-1 Comment exploiter les données

Pour expliquer le principe fondamental du système, nous nous étions placés à la section précédente dans la configuration suivante :

- les axes de rotation des cristaux sont parallèles entre eux et perpendiculaires à un même plan qui passe par les centres des cristaux. Appelons ce plan le *plan de référence* ;
- les rayons se propagent le long du plan de référence ;
- la surface de chaque cristal (les plans cristallins) passe par son axe de rotation, en conséquence de quoi les cristaux sont perpendiculaires au plan de référence.

En effet, le spectromètre agit comme une transformation d'une transition vers un profil de raie dont la forme et la position dépendent bien sûr de l'énergie, de la largeur naturelle de la transition atomique et d'autres effets (Doppler, imperfection des cristaux etc), mais aussi de la fonction de réponse du spectromètre. Le profil de réflexion que

l'on obtient, dans le mode parallèle comme dans le mode antiparallèle, dépend des paramètres géométriques spécifiques des éléments du spectromètre. Si par exemple, contrairement à ce que nous avons imposé au cours de la section précédente, le faisceau de rayons issu de la source possède une divergence verticale, celle-ci entraîne alors un élargissement du profil de réflexion, comme nous le verrons plus en détails au paragraphe III-2.

Par conséquent, pour interpréter les profils de réflexion, il est nécessaire de prendre en compte ces paramètres. Pour ce faire, il existe deux possibilités. La première serait de calculer la fonction de réponse théorique du système. La seconde, plus pratique, consiste à écrire un programme de simulation. Les paramètres dont il faut tenir compte sont par exemple la taille de l'orifice situé devant la source, la taille des cristaux, la taille du détecteur, les distances etc. Ce programme a déjà été écrit par P. Amaro qui travail au sein de notre groupe dans le cadre de son doctorat. Cette simulation tire au hasard les coordonnées donnant la direction d'un rayon X issu de la source, et utilise la fonction de réponse des cristaux pour calculer la probabilité que ce rayon soit réfléchi. Les fonctions de réponse des cristaux sont obtenues à l'aide du programme *Xop* [SANCHEZ DEL RÌO and DEJUS 2004] (voir IV-3-2.a du chapitre 1, où un exemple de fonction de réponse est donné par la figure 1.29). A l'aide d'un ajustement de courbes qui superpose les profils de réflexion simulés au profil expérimental, on peut connaître l'orientation des cristaux l'un par rapport à l'autre de façon absolue.

En laissant de côté la composante due à la fonction de réponse du spectromètre, la forme de la raie est issue de la combinaison entre une Lorentzienne (largeur naturelle dont l'élargissement Auger), et d'une Gaussienne (effet Doppler, imperfection des cristaux). Le programme d'ajustement de courbes permet de déterminer les paramètres de chaque composante dans le résultat obtenu, pour entre autre l'étude de l'effet Auger.

---

### III-2 Enjeu de l'alignement

La précision des mesures dépend donc des paramètres géométriques du spectromètre, que l'on se doit de connaître. Si les valeurs implémentées dans la simulation sont incorrectes, il en résulte une mesure fautive.

Pour illustrer le problème, voyons de manière quantitative les conséquences qu'aurait une mauvaise perpendicularité<sup>1</sup> d'un des cristaux, sur la valeur de l'angle mesuré pour la réflexion d'un rayon X (nous nous limitons à un seul rayon X pour simplifier les calculs). Sur la figure 2.6, on a représenté le problème.

Le cristal est incliné d'un angle  $\gamma$  par rapport à la verticale. Le faisceau incident est dans le plan de référence, l'autre cristal est perpendiculaire à ce plan. L'angle mesuré  $\tilde{\theta}_B(\gamma, \theta_B)$  est :

$$\tilde{\theta}_B(\gamma, \theta_B) = \arcsin \left( \frac{\sin \theta_B}{\cos \gamma} \right). \quad (2.1)$$

Dans cette démonstration, on a pour simplifier assimilé l'angle de réflexion du rayon par rapport à la normale du cristal à l'angle  $\theta_B$ , solution de la loi de Bragg.

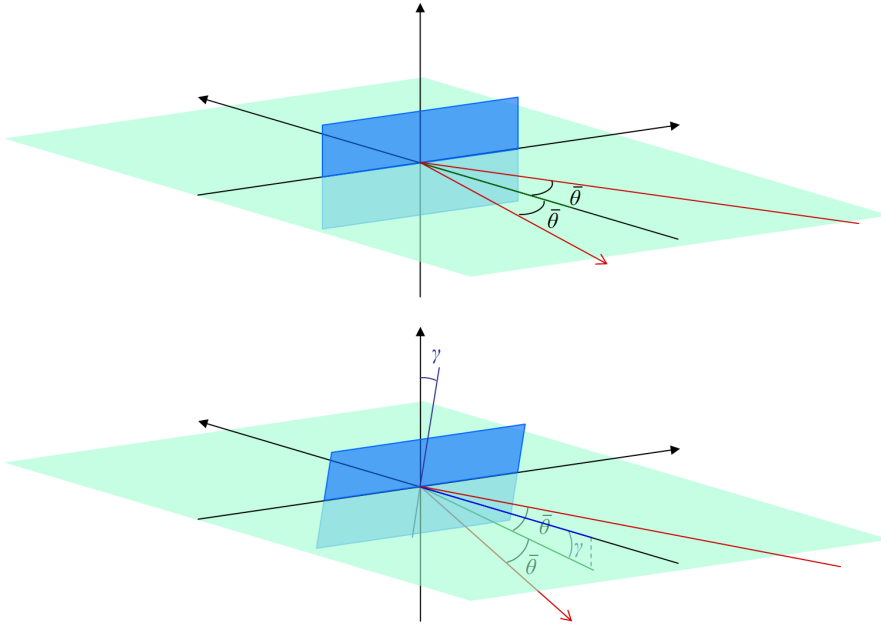
---

1. par rapport au plan de référence



L'inclinaison du cristal crée une erreur relative  $\delta E/E$  sur l'énergie (en utilisant le résultat 2.1 et la loi de Bragg 1.1) égale à

$$\frac{\delta E}{E}(\gamma) = \frac{1}{E} \left( E - \frac{hc}{2d \sin(\tilde{\theta}_B)} \right) = 1 - \cos(\gamma). \quad (2.2)$$



**Fig. 2.6** – Le faisceau incident est toujours dans le plan de référence : en vert. L'angle représenté  $\tilde{\theta}$  est  $\frac{\pi}{2} - \theta_B$ , le complémentaire de l'angle de Bragg. Figure du haut : un rayon X est réfléchi par un cristal perpendiculaire au plan de référence : le faisceau réfléchi est aussi dans le plan de référence. Figure du bas : un rayon X est réfléchi par un cristal incliné d'un angle  $\gamma$  par rapport à la verticale ; le rayon réfléchi se propage sous le plan de référence.

On peut aller plus loin en calculant l'erreur sur l'énergie relative due à une inclinaison des deux cristaux. Elle est donnée par :

$$\frac{\delta E}{E}(\gamma_1, \gamma_2, \theta_B) = \frac{1}{E} \left( E - \frac{hc}{2d \sin(\tilde{\theta}_1/2 + \tilde{\theta}_2/2)} \right), \quad (2.3)$$

avec  $\tilde{\theta}_1(\gamma_1, \theta_B) = \arcsin(\sin \theta_B / \cos \gamma_1)$  correspond au cristal interne et où  $\gamma_1$  est son inclinaison, et  $\tilde{\theta}_2(\gamma_1, \gamma_2, \theta_B) = \arcsin(\sin \theta_B \cos \gamma_2 / \cos(2\gamma_1))$  correspond au cristal externe et où  $\gamma_2$  est son inclinaison. En pratique, l'erreur relative ne dépend quasiment pas de  $\theta_B$ .

Cela illustre le fait que si l'un des cristaux par exemple n'est pas perpendiculaire au plan de référence, il faut soit prendre en compte ce défaut d'orientation dans la simulation, soit agir mécaniquement sur l'orientation du cristal pour qu'il soit suffisamment perpendiculaire au plan de référence.

D'une manière réciproque, imaginons à présent que les cristaux soient bien perpendiculaires au plan de référence, mais que le faisceau incident (unidirectionnel dans cet exemple) ne se propage plus à présent le long de ce plan. Cela est équivalent à dire que le spectromètre n'est pas aligné avec l'axe de la source. Si un rayon X a une direction descendante par exemple, la trajectoire qu'il va décrire sera sur un plan incliné qui ne correspondra pas au plan de référence. La mesure ne correspondra alors pas à l'angle réel de réflexion du rayon par rapport au plans cristallins, mais à sa projection sur le plan horizontal.

L'erreur sur l'énergie relative due à un mauvais alignement du spectromètre par rapport à la source est donnée par :

$$\frac{\delta E}{E}(\beta, \theta_B) = \frac{1}{E} \left( E - \frac{hc}{2d \sin(2 \arcsin(\sin \theta_B / \cos \beta))} \right), \quad (2.4)$$

où  $\beta$  est l'angle du rayon incident avec le plan de référence. Ici aussi, l'erreur relative ne dépend quasiment pas de  $\theta_B$ .

Cela montre que si l'on a une source divergente, les rayons X (d'une longueur d'onde donnée) ne seront plus réfléchis pour une seule valeur de l'angle relatif entre les cristaux, mais dans un certain intervalle dépendant de cette divergence. On a donc une figure de dispersion élargie et il est donc indispensable de gérer cela soit en prenant en compte les paramètres géométriques de la source dans la simulation, soit en forçant les rayons X à se propager sur le plan horizontal en installant un collimateur<sup>1</sup>.

En résumé, même si la configuration expérimentale s'éloigne de la configuration idéale, il est possible d'inclure ces imperfections dans l'analyse des résultats, c'est-à-dire dans la simulation. Cependant, il est difficile de mesurer les défauts du spectromètre. Il est plus facile de tenter d'avoir un système dont la conception même respecte une configuration idéale, dans l'intervalle de tolérance imposé par la précision visée. Nous allons voir dans la section IV ce qui a été mis en œuvre pour atteindre cet objectif.

---

## IV Caractéristiques techniques du spectromètre

---

Le spectromètre est représenté schématiquement sur la figure 2.9, et par une photographie sur la figure 2.8. La figure 2.7 est une photographie de l'enceinte du spectromètre lorsqu'elle n'avait pas encore été assemblée.

---

1. Si l'on choisit de ne pas utiliser de collimateur, on aura malgré tout un élargissement des raies du spectre modéré et donc une assez bonne résolution, car grâce à l'effet de projection, le décalage entre l'angle de Bragg et l'angle mesuré reste faible même pour des angles d'inclinaison importants.

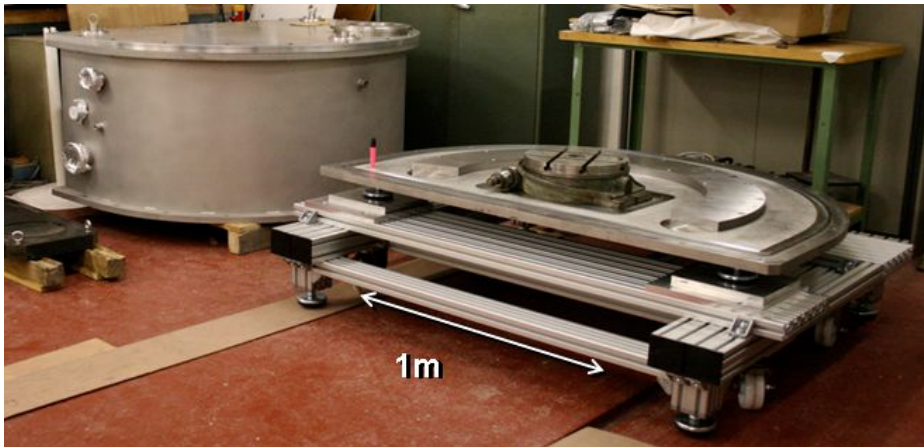


Fig. 2.7 – Photographie de l'enceinte du spectromètre avant le montage.

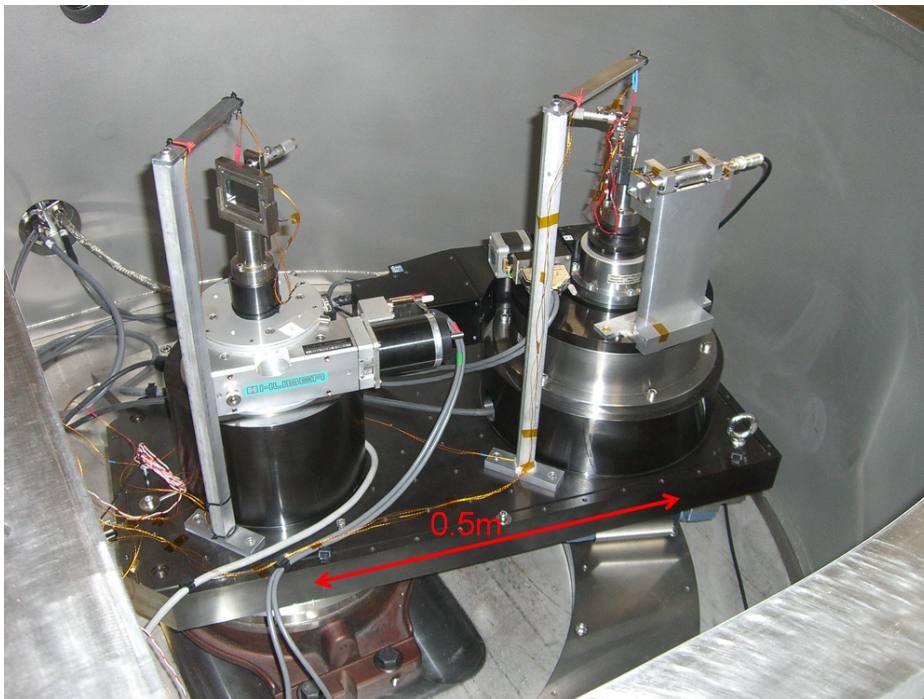


Fig. 2.8 – Photographie de l'intérieur de l'enceinte du spectromètre.

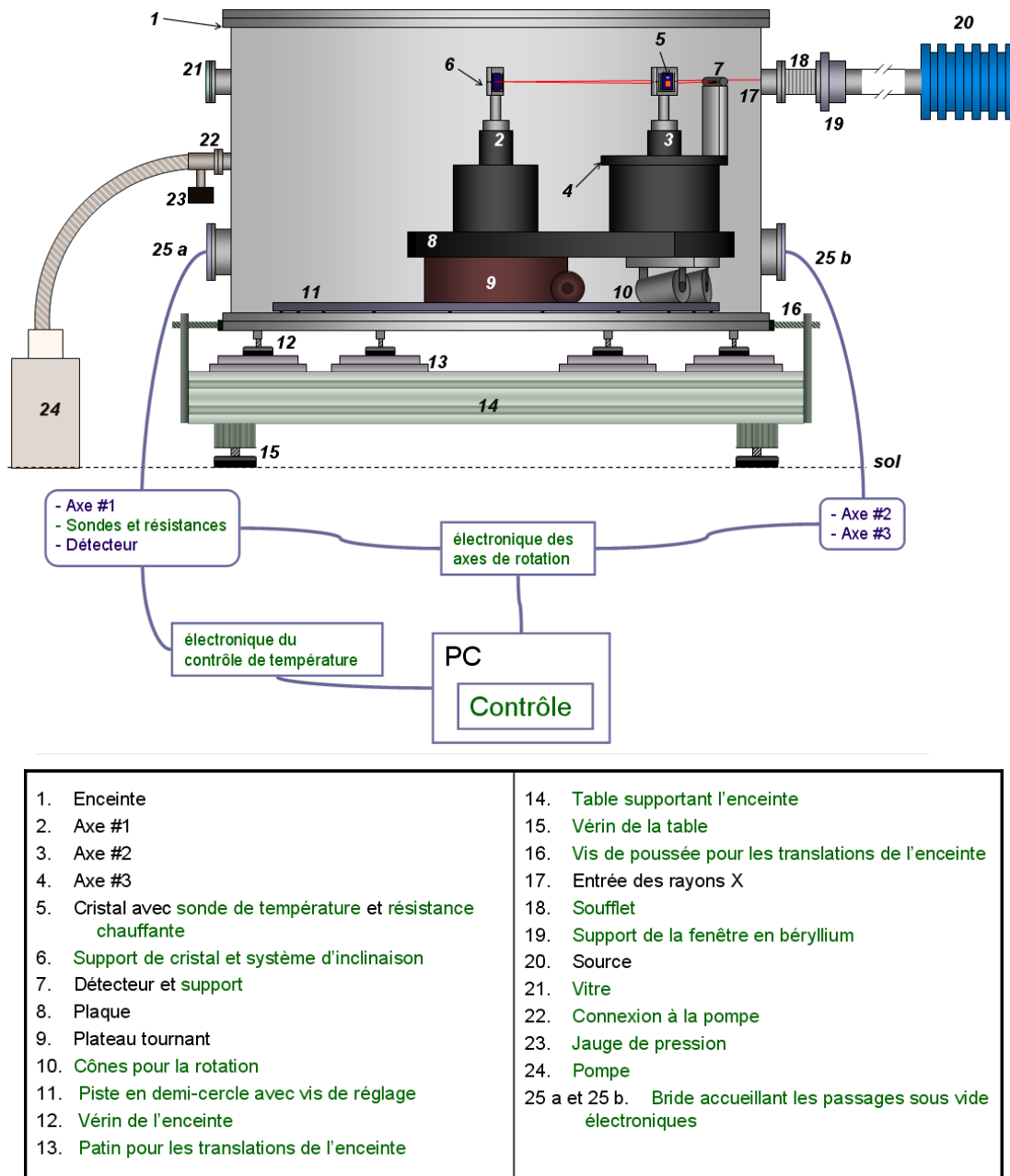


Fig. 2.9 – Schéma général du spectromètre à deux cristaux plans. Les éléments de la légende et du schéma écrits en vert correspondent à ce qu'il restait à réaliser au moment de mon arrivée dans le groupe.

Ma part de travail dans l'élaboration du spectromètre a porté sur le développement des éléments mécaniques représentés en vert sur la figure 2.9. Les éléments clés du spectromètre tels que les cristaux, les axes de rotation et leurs encodeurs, la plaque accueillant les axes, le détecteur ou encore l'enceinte étaient déjà présents à mon arrivée dans le groupe. Le développement de l'électronique et du programme d'interface

permettant le contrôle du spectromètre a été pris en charge par d'autres membres de l'équipe et du laboratoire.

---

## IV-1 Cristaux

### IV-1-1 La distance interréticulaire

On utilise des cristaux de silicium, dont le double de l'espace interréticulaire (ou «  $2d$  ») dans le vide à 22.5°C est<sup>1</sup> 0,6271202460(17) nm pour le Si111 et 0,3840311524(10) nm pour le Si220 [MOHR ET AL. 2008]<sup>2</sup>. Par rapport à la précision visée par nos mesures (environ 1 ppm) cela ne constitue pas un facteur d'incertitude important. En revanche, on doit corriger cette valeur en fonction de la température de 3 ppm/°C environ [OKADA and TOKUMARU 1984]. La valeur de l'énergie étant directement reliée à celle de l'espace interréticulaire, il est très important de mettre en place expérimentalement un dispositif permettant de connaître à mieux de 0,3°C près la température du cristal, mais aussi de stabiliser sa valeur au cours des mesures (voir la section IV-3-1).

### IV-1-2 Caractéristiques des cristaux

Ces cristaux ont été taillés au NIST<sup>3</sup>. Leurs dimensions sont d'environ  $50 \times 30 \times 4$  mm<sup>3</sup>. Leurs surfaces principales ont été découpées de sorte à être parallèles aux plans cristallins que l'on a choisi d'utiliser (111 et 220) avec une précision inférieure à la minute d'arc (0,017 degrés). Pour enlever les contraintes mécaniques (déformations) provoquées par la découpe, et éviter l'effet de mosaïque<sup>4</sup> les cristaux sont ensuite plongés dans un bain d'acide fluorhydrique, c'est pourquoi leurs surfaces sont dépolies (voir la figure 2.11). L'espace interréticulaire a été testé et comparé aux valeurs standards.

---

## IV-2 Alignement géométrique

### IV-2-1 Rotation de l'ensemble des axes

Il faut pouvoir positionner le cristal externe (second à réfléchir les rayons X) sur la trajectoire des rayons X réfléchis par le cristal interne. Pour cela, on a choisi d'installer l'ensemble des axes sur une plaque (élément n°14 de la figure 2.9) pouvant pivoter et dont l'axe de rotation est confondu avec l'axe interne, celui du premier des cristaux à réfléchir les rayons. La plaque de soutien est suffisamment épaisse (6 cm) pour éviter les

---

1. Les deux chiffres entre parenthèses représentent l'incertitude sur les derniers chiffres.

2. Le résultat de [MOHR ET AL. 2008] est obtenu à partir des résultats de [BECKER ET AL. 1981 ; CAVAGNERO ET AL. 2004 $b,a$  ; NAKAYAMA and FUJIMOTO 1997 ; BECKER ET AL. 2007 ; MARTIN ET AL. ; BECKER 2003 ; KRÜGER ET AL. 1998]

3. National Institute of Standards and Technology

4. L'effet de mosaïque correspond à la présence sur la surface de petits fragments de cristal, dont les orientations sont aléatoires. Leur présence élargirait la fonction de réponse des cristaux.

déformations dues au poids des axes (quelques dizaines de kilos chacun). La plaque a été recuite à 900°C pour enlever les contraintes structurelles provoquées par l'usinage. Elle est en acier spécial (LK3) qui a la propriété de minimiser ces contraintes. L'ensemble plaque+axes pèse environ 200 kg, c'est pourquoi la solution consistant à poser la plaque sur un plateau de rotation (élément n°9 de la figure 2.9) habituellement utilisé sur des fraiseuses<sup>1</sup> et capable de supporter de telles charge a été retenue.

Les applats qui servent à accueillir les axes ont été rectifiés par rapport à l'aplat situé sous la plaque qui sert à positionner celle-ci sur le plateau tournant. Ces trois plans sont parallèles à mieux de 0,003 degrés près, ce qui constitue une erreur sur les énergies négligeable.

Pour pouvoir soutenir la plaque à son extrémité et faciliter la rotation, on a choisi d'y installer des roues coniques (élément n°10 de la figure 2.9) ayant reçu un traitement qui a accru leur dureté. Ces cônes roulent sur une piste en demi-cercle (élément n°8 de la figure 2.9) ayant reçu le même traitement (voir la figure 2.10). La piste a été conçue de sorte à ce que l'on puisse changer son orientation. En effet, celle-ci doit être parfaitement perpendiculaire à l'axe de rotation de la plaque afin que les roues coniques puissent y reposer parfaitement. Le système de réglage consiste en une quinzaine de vis de poussée logées dans la piste, intercalées avec des vis de maintien.



Fig. 2.10 – Photographie des roues coniques.

En principe, l'axe de rotation de la plaque est confondu avec l'axe du premier des cristaux à réfléchir les rayons, ainsi, les centres des cristaux appartiennent toujours au même plan quelque soit l'orientation de la plaque autour de son axe. Cela permet, si l'on aligne les centres des cristaux avec la direction de la source pour une position de la plaque donnée, de conserver la coplanéarité des éléments dans la rotation. Néanmoins, il existe un certain jeu dans le plateau tournant, qui empêche de garantir que l'axe de rotation de la plaque soit perpendiculaire au plan de référence à mieux de 0,05 degrés près. Si un collimateur est positionné au niveau du spectromètre, il garanti l'alignement de la source avec les cristaux. Si l'on utilise pas de collimateur, l'erreur commise est de l'ordre de quelques dixièmes de ppm.

---

1. Les fraiseuses sont des machines-outils utilisées pour usiner tous types de pièces mécaniques.



#### IV-2-2 Parallélisme des axes entre eux

Les axes sont eux aussi en LK3, et ont été recuits pour ôter les contraintes structurales provoquées par l'usinage. Les rectifications des pièces permettent d'avoir des axes de rotation parallèles (par rapport à la précision visée). Néanmoins, les surfaces supérieures qui servent à accueillir les supports de cristaux peuvent avoir un défaut de perpendicularité par rapport aux axes d'environ 0,02 degrés, ce qui constitue une erreur sur les énergies de l'ordre de 0,1 ppm.

#### IV-2-3 Position des cristaux par rapport aux axes

La surface d'un cristal doit contenir son axe de rotation (sans quoi procéder à une rotation de l'axe ne reviendrait pas seulement à tourner le cristal, mais aussi à le translater). Pour cela, on a conçu un support adéquat pour le cristal : voir la figure 2.11. Sa base cylindrique vient se loger concentriquement sur la surface supérieure de l'axe grâce à des pions de centrage.

La partie supérieure du support est constituée d'un cadre dont la face interne contient l'axe du cylindre. Ainsi, lorsque le cristal est placé dans son support, sa surface est automatiquement tangente à l'axe de rotation. Grâce aux contraintes imposées pour la fabrication des supports, ces pièces ne contribuent pas à l'erreur sur les énergies. En revanche, le réglage de l'inclinaison des cristaux est une étape déterminante pour la précision des mesures.

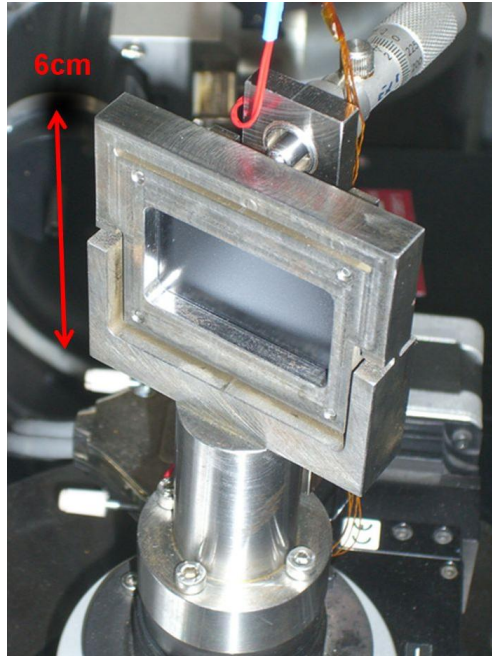


Fig. 2.11 – Photographie d'un des support de cristal.

En effet, nous l'avons déjà vu précédemment (II-2-2), la surface optique du cristal peut ne pas être parallèle aux plans cristallins (angle de coupe). On a donc prévu un système permettant d'ajuster l'inclinaison verticale des cristaux pour forcer les plans

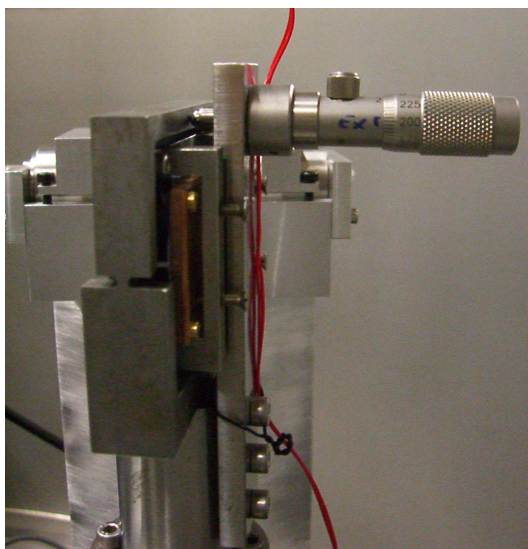


Fig. 2.12 – Photographie du système permettant d’incliner le cristal.

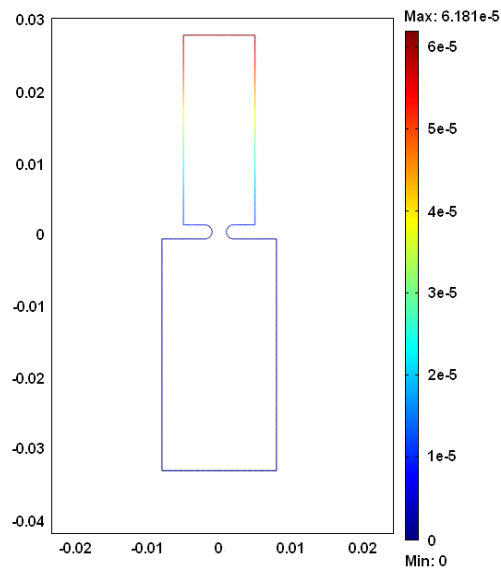
cristallins à être parallèles aux axes de rotation. Cette inclinaison doit se faire autour d’un axe coupant l’axe de rotation. Pour cela on a choisit d’utiliser la technique appelée « flexures » [PAROS and WEISBORD 1965] qui exploite l’élasticité du métal. Les bords latéraux du cadre du support sont amincis tous deux au même niveau (environ à mi-hauteur du cadre) grâce à la découpe représentée sur les figures 2.12 et 2.13. La distance séparant les deux fentes en forme de « u » est de 2 mm. Les ajourages fins et précis ont été réalisés par une machine automatisée à électro-érosion à fils. Ainsi, la partie supérieure du cadre à laquelle le cristal est rattaché n’est reliée à la partie inférieure que par les minces zones de matière restant entre les fentes en forme de « u ». En utilisant la vis micrométrique en contact avec le centre du bord supérieur du cadre, on peut exercer une force sur celui-ci. Elle se convertit en une rotation de la partie supérieure du cadre autour de l’axe formé par les centres des parties amincies des bords. Le déplacement du centre de rotation est micrométrique, ce qui est négligeable et aurait été difficile à obtenir avec un système de rotation classique.

Pour déterminer les dimensions idéales à donner à ces amincissements (le rayon de courbure de la partie interne des fentes, la distance qui les sépare, l’épaisseur du cadre...) on a utilisé un article théorique [PAROS and WEISBORD 1965], ainsi qu’un programme de simulation de contrainte mécanique (comsol®) et on a réalisé des tests sur des échantillons qui se sont révélés être en bon accord avec les prédictions théoriques et en très bon accord avec les prédictions de la simulation. Sur la figure 2.13 est représenté le mouvement subi par la pièce lorsque la vis micrométrique exerce une force sur celle-ci.

#### IV-2-4 Position du spectromètre par rapport à la source

Il faut pouvoir aligner le spectromètre avec la direction moyenne des rayons émis par la source. Pour cela, la table supportant le spectromètre (élément n°14 de la figure 2.9) à été conçue de sorte à pouvoir ajuster sa position dans toutes les directions de

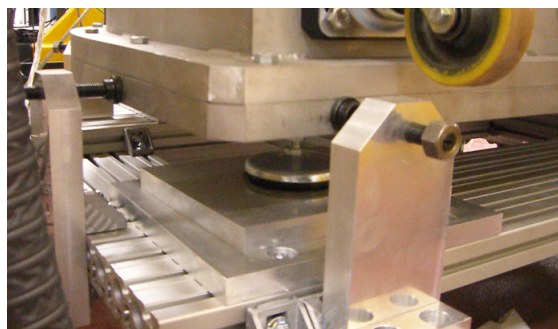




**Fig. 2.13** – Illustration du mouvement d’inclinaison des supports de cristaux. A l’aide de simulations réalisées avec comsol®, on a pu déterminer les proportions idéales à donner à la pièce. On voit qu’une force exercée au niveau du bord supérieure du cadre se convertie en une rotation de la partie supérieure de celui-ci autour du centre des parties amincies des bords.

l’espace. Les vérins de la table (éléments n°15 de la figure 2.9) permettent d’orienter le plan du spectromètre.

D’autre part, l’enceinte repose sur 4 pieds (éléments n°12 de la figure 2.9) eux-mêmes posés sur des patins (éléments n°13 de la figure 2.9) permettant les translations (voir la figure 2.14). Les 6 vis de poussée réparties autour de l’enceinte (éléments n°16 de la figure 2.9) permettent de translater et de tourner le spectromètre.



**Fig. 2.14** – Photographie du système de translation du spectromètre.

### IV-3 Contrôle du spectromètre

Le contrôle des axes du spectromètre se fait à partir d'un ordinateur, à l'aide d'une interface Labview®.

Une carte National Instrument® NI DAQ-mx 6602 sert d'interface entre les programmes et les différents boîtiers électroniques reliés aux moteurs pas à pas et au détecteur.

#### IV-3-1 Asservissement en température

##### IV-3-1.a Résistances chauffantes

Le cristal est maintenu contre le cadre de son support par légère compression à l'aide de quatre vis. Pour éviter d'endommager le cristal, on a intercalé une pièce de cuivre entre celui-ci et les vis. Cette pièce, constituée de deux plaques de cuivre maintenues ensemble par quatre vis, sert également à accueillir une résistance chauffante (élément n°5 de la figure 2.9) extrêmement fine ( $< 0,1$  mm) de  $2,5 \times 2,5$  cm<sup>2</sup> environ. Celle-ci est insérée entre les deux plaques (voir la figure 2.15). Les résistances que nous utilisons font  $78 \Omega$  et peuvent délivrer une puissance allant jusqu'à 30 W.

##### IV-3-1.b Sondes de température

On a choisi d'utiliser de très petites sondes (environ  $2 \times 2 \times 1$  mm<sup>3</sup>) pouvant être mises en contact direct avec le cristal (élément n°5 de la figure 2.9). Ces sondes sont simplement des résistances en fil de platine (PT100) de classe 1/3 DIN qui donnent une température absolue à  $0,1^\circ\text{C}$  près sans étalonnage. On a fait étalonner ces sondes, ce qui a permis d'avoir une incertitude sur la mesure de  $0,02^\circ\text{C}$ , ce qui correspond à une incertitude de l'ordre de  $0,06$  ppm sur les énergies.

##### IV-3-1.c Electronique

Les signaux des sondes et des résistances chauffantes sont gérés par des boîtiers de contrôle avec lesquels communique l'ordinateur. On a utilisé des boîtiers Jumo® Dicon 500 associé à des circuits électroniques conçus au laboratoire qui permettent d'adapter les signaux aux résistances que nous avons choisies, c'est-à-dire de convertir la tension délivrée par les boîtiers en courant adéquat.

#### IV-3-2 Détection

Le détecteur est un compteur proportionnel constitué d'une cellule de gaz xénon (90%) et méthane (10%) au milieu de laquelle se situe l'extrémité d'un fil conducteur mis sous haute tension (2000 V) faisant office d'anode. Lorsqu'un rayon X pénètre dans le détecteur, il ionise les atomes du gaz. Les électrons libérés sont accélérés par le fort champ électrique et peuvent ainsi ioniser par collision d'autres atomes. Le détecteur a la propriété de fournir un signal où chaque impulsion correspond à un rayons X

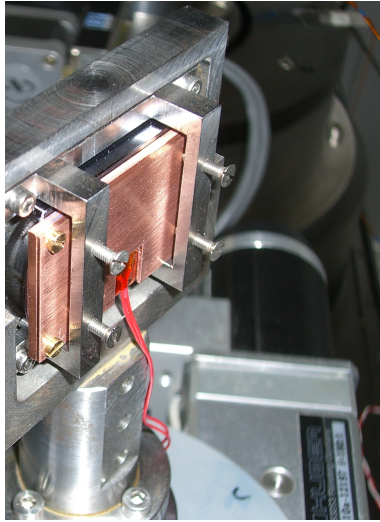


Fig. 2.15 – Photographie des plaques de cuivre accueillant les résistances chauffantes.

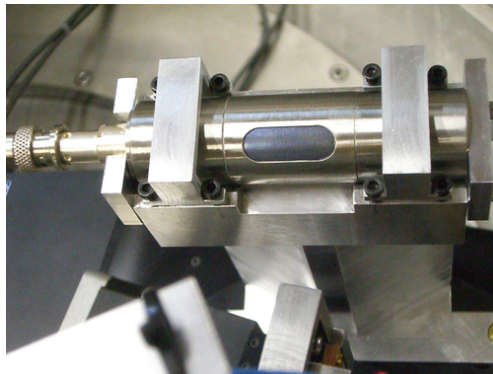


Fig. 2.16 – Photographie du détecteur sur son support.

reçu. D'autre part, les aires des impulsions sont proportionnelles à la charge reçue par l'anode, qui est directement reliée à l'énergie du photon qui en est à l'origine, ce qui permet de sélectionner les événements dans un intervalle correspondant à la gamme d'énergie que l'on étudie. Le signal est pré-amplifié, puis traité analogiquement, et il est enfin enregistré par l'ordinateur de sorte à être associé à la position des cristaux par le programme d'acquisition lors de la procédure de balayage des angles. La taille de la partie active du détecteur est d'environ  $1,2 \times 2,5 \text{ cm}^2$ , ce qui est suffisant pour récupérer une grande partie des rayons réfléchis, la source ayant une extension d'environ 2 cm.

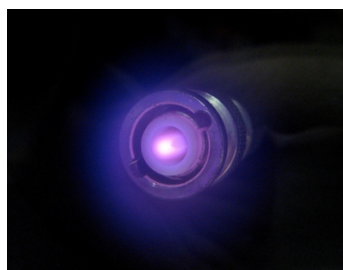
#### IV-3-2.a Effet des variations d'intensité de la source au cours de la prise de données

Des changements d'intensité de la source au cours de l'obtention d'un spectre (c'est-à-dire au cours de la procédure de rotation du cristal externe) changent l'allure des spectres. Pour éviter cela il faudra soit maîtriser l'intensité émise par la source, soit normaliser les spectres en utilisant un autre détecteur permettant de connaître à chaque

instant l'intensité de la source. Ceci n'a pas encore été introduit dans l'expérience.

### IV-3-2.b *Effet du vide sur les éléments électroniques mis sous haute tension*

Lors de la mise sous vide de l'enceinte et alors que le détecteur était mis sous haute tension, on a remarqué que celui-ci cessait de fonctionner dans la gamme de pression allant de 40 mbar à 1 mbar. Ce phénomène s'explique par le fait que lorsque l'air se raréfie, des arcs électriques apparaissent au niveau du branchement du câble haute tension, comme le prévoit la loi de Paschen [[PASCHEN 1889](#)]. Lorsque la pression descend encore, les arcs disparaissent. Les décharges ont détruit le pré-amplificateur du détecteur, qui a dû être remplacé.



**Fig. 2.17** – Décharge au niveau du câble haute tension lorsque la pression dans l'enceinte est comprise entre 40 mbar et 1 mbar.

### IV-3-3 **Vide**

#### IV-3-3.a *Pompage*

Pour éviter que des rayons X appartenant à la gamme d'énergie qui nous intéresse ne soient absorbés par les molécules d'air, ce qui diminuerait l'intensité effective de la source, l'enceinte est vidée de son air jusqu'à une pression de 0,1 mbar environ à l'aide d'une pompe primaire. A ce niveau de vide, il n'y a plus de décharge au niveau de la connexion du câble haute tension au détecteur (voir [IV-3-2.b](#)).

#### IV-3-3.b *Isolation du spectromètre avec la source*

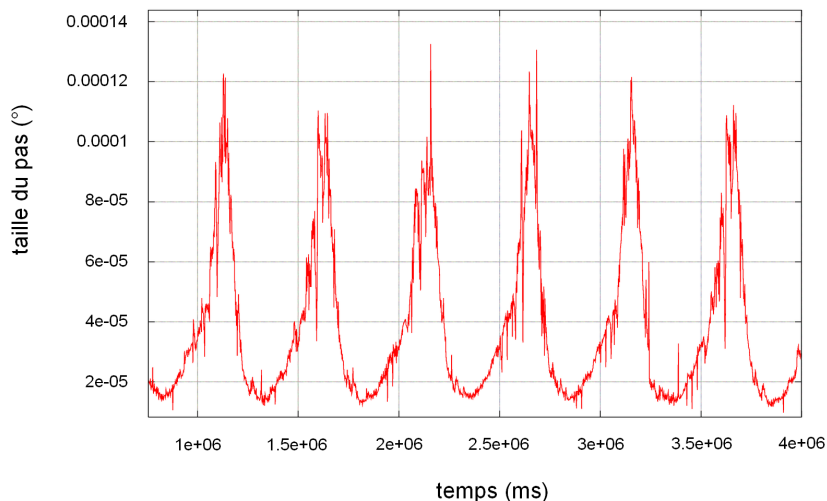
La source doit être maintenue à un vide beaucoup plus poussé que le spectromètre (quelques  $10^{-7}$  mbar), c'est pourquoi les atmosphères de la source et du spectromètre doivent être séparées. On a isolé les deux chambres avec une feuille de béryllium de 0,25 mm d'épaisseur, laissant passer environ 90% des rayons X à 3 keV [[SENEMAUD 1969](#)]. Celle-ci est maintenue entre deux brides serties de joints toriques vissées l'une à l'autre. Le tout est logé dans une pièce tubulaire s'adaptant à la bride de sortie de la source (élément n°19 de la figure [2.9](#)).

A cause de la différence de pression régnant entre les deux côtés de la fenêtre de béryllium, celle-ci acquiert définitivement une forme bombée. Pour ne pas contrarier cette forme et éviter que la fenêtre ne se casse, il faut toujours veiller à ce que la pression côté source de la fenêtre soit inférieure ou égale à la pression côté spectromètre.

#### IV-3-4 Lecture des angles

La largeur angulaire caractéristique des raies de transitions obtenues à l'aide des cristaux Si111 et Si220 est de l'ordre de quelques centièmes de degrés, soit quelques centaines de microradians. On doit donc pouvoir imposer aux cristaux des mouvements d'amplitudes bien plus petites. Les moteurs pas à pas ne peuvent pas opérer de mouvements ayant constamment la même amplitude. Nous avons observé avec nos moteurs, pour les pas ayant la plus petite résolution (autour de  $5 \cdot 10^{-5}$  degrés) des amplitudes pouvant varier d'un facteur 10. La figure 2.18 représente l'amplitude effective des pas opérés par un des moteurs, alors que l'ordre correspondait à faire des pas d'amplitude constante. On remarque que celle-ci varie en moyenne périodiquement, ceci étant dû à la conception même des moteurs. D'autre part, on a observé une dérive de la position des axes au cours du temps sans qu'aucun ordre de mouvement ne soit donné. Ceci est dû à une rotation de l'axe possible à cause du jeu existant dans les mécanismes du moteur, ainsi qu'à du bruit électronique.

Il est d'autre part indispensable de disposer d'un système mesurant à chaque instant la position angulaire des axes de façon absolue. Pour cela, on utilise des encodeurs Heidenhain® ROD800 pour le cristal interne et Heidenhain® RON905 pour le cristal externe. Le principe de fonctionnement d'un encodeur consiste en un disque gravé solidaire de l'axe de rotation. La gravure est un code lu par un système fixe composé d'une source lumineuse et d'éléments photoélectriques dont les signaux sont envoyés à des cartes d'interface. Celle de l'axe interne est une carte IK220 pouvant calculer sa position angulaire avec une résolution de  $2,5 \cdot 10^{-6}$  degrés. Celle de l'axe externe est un boîtier Heidenhain AWE 1024 relié à une carte GPIB de l'ordinateur donnant une précision d'environ  $2 \cdot 10^{-6}$  degrés<sup>1</sup>.



**Fig. 2.18** – La taille des pas des moteurs n'est pas constante. Pour ce moteur et des pas de résolution minimale ( $5 \cdot 10^{-5}$  degrs, l'amplitude d'un pas peut varier d'un facteur 10.

1. Une différence d'angle de  $6 \cdot 10^{-5}$  degrés correspond à une différence d'énergie relative de 1 ppm.

## IV-4 Procédure d'alignement

### IV-4-1 Alignement des axes

On a utilisé un théodolite pour pouvoir aligner le spectromètre sur l'axe de référence constitué par les éléments de la source. Un théodolite est un instrument permettant de déterminer une direction. C'est une lunette de focale réglable équipée d'une mire pouvant pivoter sur les axes vertical et horizontal. Chacun des axes est équipé d'un goniomètre.

Le théodolite est placé sur un trépied, de sorte à se placer à la hauteur de l'axe de la source. On oriente la base du théodolite horizontalement à l'aide de deux niveaux à bulle orthogonaux. On ajuste la hauteur et l'orientation des axes jusqu'à ce que la mire de la lunette soit au centre de chacun des différents éléments de la source. L'ajustement de la mire se fait par rapport à des orifices qui se trouvent à des différentes distances du théodolite, or la bague de réglage de la lunette sélectionne le plan focal, on ne peut donc voir qu'un des orifices à la fois. A l'issue de l'alignement, le théodolite est orienté sur l'axe de la source, représenté par deux orifices d'environ 2 cm séparés d'environ 2,5 m avec une précision de l'ordre de 0,017 degrés.

A l'aide des éléments de réglage de la table supportant le spectromètre, on place les centres des ouvertures de l'enceinte (éléments n°17 et n°21 de la figure 2.9) sur la mire du théodolite c'est-à-dire sur l'axe de référence.

La plaque supportant les axes (élément n°8 de la figure 2.9) est ensuite positionnée à l'aide du plateau rotatif de sorte que les supports de cristaux soient grossièrement alignés avec l'axe de référence. On aligne ensuite finement les centres des supports de cristaux sur l'axe de référence (indiqué par le théodolite), en réglant la position de l'enceinte à l'aide des éléments de la table et en utilisant des mires apposées sur les supports de cristaux. L'incertitude sur l'alignement des supports sur l'axe de la source est de l'ordre de 0,08 degrés, ce qui représente une incertitude de l'ordre du 1 ppm sur les énergies.

On a vérifié que les cristaux se trouvaient bien sur l'axe de la source en éclairant celle-ci par l'arrière avec une lampe de gros diamètre. Le spot lumineux devant atteindre les centres des supports. On a ensuite vérifié que les cristaux se trouvaient dans la direction moyenne du faisceau de rayons X en utilisant une plaque photosensible aux rayons X apposée sur les supports de cristaux, la partie atteinte par les radiations devant se trouver au centre.

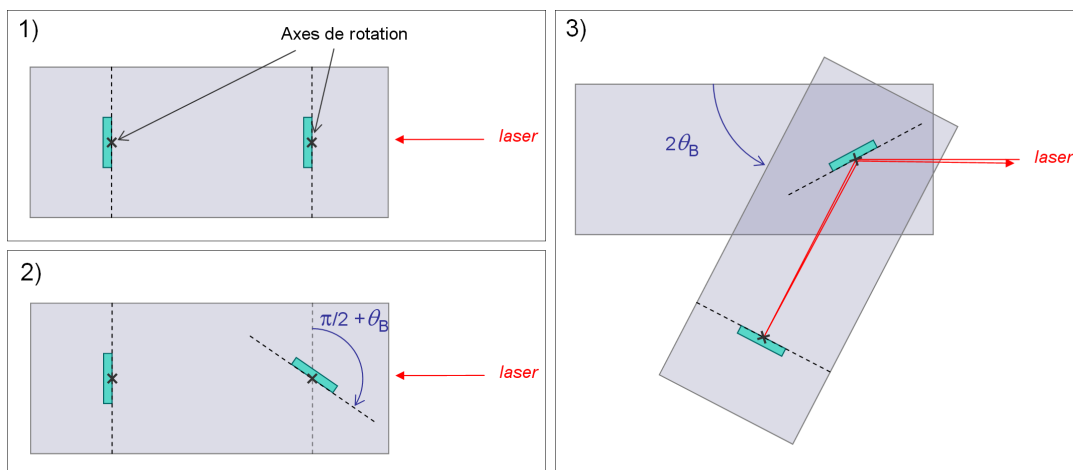
Pour diminuer la valeur de ce facteur d'incertitude, il est envisagé d'utiliser un collimateur qui donnerait l'avantage d'avoir un meilleur contrôle de la direction du faisceau de rayon X. Ce collimateur pourrait être placé entre les cristaux par exemple. Les collimateurs pour rayons X sont constitués de plaques de plomb parallèles, dont l'espacement et la taille limitent la divergence et contrôlent la direction du faisceau de rayons X.

#### IV-4-2 Ajustement de l'inclinaison des supports de cristaux

Les parties inclinables des supports de cristaux ont été précontraintes dans le sens opposé à la poussée de la vis micrométrique de quelques minutes d'arc afin de pouvoir compenser l'angle de coupe des cristaux. On a donc ajusté l'inclinaison verticale des cadres des supports de cristaux pour qu'il soient parallèles aux axes de rotation. Cet alignement est préliminaire, en attendant l'ajustement de l'orientation des plans cristallins, seuls à compter dans notre expérience, à l'aide des rayons X de la source. Pour réaliser cet ajustement, on a installé à l'arrière de la source un laser à environ 3 m de l'axe interne sur la direction formée par les centres des supports de cristaux alignés sur l'axe de référence, ce qui correspond en principe à un axe parallèle au plan du spectromètre (c'est-à-dire perpendiculaire aux axes de rotation). La précision sur la direction du laser, dont va dépendre la précision sur l'inclinaison des supports de cristaux par rapports aux axes, est d'environ 0,08 degrés. On a installé des miroirs sur les supports à la place que doivent occuper les cristaux. On a ajusté l'inclinaison de chaque support l'un après l'autre en faisant revenir le faisceau incident sur lui-même. On a ainsi incliné les cadres des supports perpendiculairement au plan du spectromètre. L'incertitude sur l'inclinaison de chaque cristal est de l'ordre de 0,08 degrés, ce qui correspond à une incertitude sur les énergies de l'ordre de 2 ppm (voir § III-2).

#### IV-4-3 Procédure pour positionner précisément la plaque

On doit positionner la plaque de façon à ce que le cristal externe soit sur la trajectoire des rayons réfléchis par le cristal interne. Bien que le plateau diviseur possède une graduation, celle-ci n'est pas suffisamment précise (l'angle séparant deux graduations est de 1 degré).



**Fig. 2.19** – Procédure pour positionner précisément la plaque dans la configuration de l'acquisition des données. Les cristaux sont remplacés par des miroirs optiques.

On a utilisé des miroirs placés dans les supports de cristaux et le laser pour positionner plus précisément la plaque. La configuration initiale des miroirs et de la plaque est illustrée par l'image 1) de la figure 2.19 : les centres des miroirs sont alignés avec

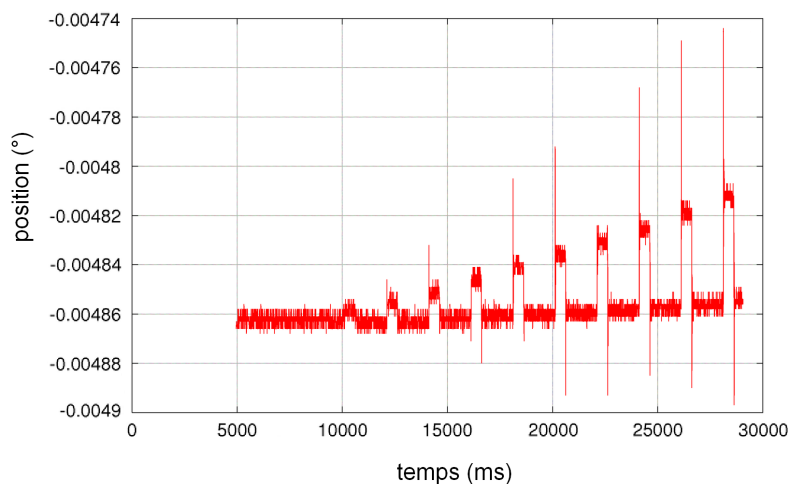


le laser. On tourne le miroir interne à l'aide de son moteur d'un angle égal à  $\pi/2 + \theta_B$  (schéma 2 de la figure 2.19). On tourne ensuite la plaque jusqu'à ce que le faisceau incident revienne sur lui-même, ce qui correspond à la tourner d'un angle de  $2\theta_B$  (image n°3 de la figure 2.19). La plaque est alors à la position voulue pour l'acquisition.

#### IV-5 Acquisition des données

Les moteurs pas à pas ont la particularité d'avoir deux régimes de fonctionnement. Afin d'éviter une surchauffe, si la carte de contrôle n'a pas reçu d'ordre de mouvement pendant plus d'une demie-seconde, le moteur se met automatiquement en régime de repos, c'est-à-dire que le courant qui parcourt la bobine qui sert à effectuer les mouvements diminue instantanément. Cela a pour effet de relâcher la contrainte qu'imposait le champ magnétique de la bobine sur le mécanisme du moteur, ce qui se répercute sur la position angulaire de l'axe. La figure 2.20 illustre cet effet. Lors d'une acquisition, le moteur de l'axe interne est en régime de repos, alors que celui de l'axe externe est en permanence maintenu hors de ce régime, c'est-à-dire qu'il change en permanence de position.

Si la position de l'axe interne dérive au cours du temps et sort d'un intervalle de tolérance (on a choisi  $10^{-5}$  degrés dans notre cas), le programme d'acquisition stoppe automatiquement le comptage et une procédure pour repositionner l'axe interne est effectuée.



**Fig. 2.20** – Illustration du régime de repos d'un moteur pas-à-pas. Des ordres de mouvements sont donnés au moteur à intervalles réguliers, suffisamment longs pour que le moteur entre en régime de repos entre deux ordres. Lorsque le moteur passe en régime de repos, la diminution de l'intensité du courant dans la bobine magnétique induit une diminution des contraintes sur les mécanismes du moteur. Ceci engendre un mouvement du moteur vers une nouvelle position d'équilibre.

La méthode suivie pour produire les spectres consiste à produire un histogramme



découpé en intervalles de valeurs constantes dans lesquels il y a plusieurs points de mesures différents. C'est-à-dire que le nombre de coups compté pour chaque intervalle est l'intégrale du spectre sur cet intervalle. Il est important de noter que quelque soit la méthode d'échantillonnage utilisée, l'essentiel est d'utiliser la même méthode dans l'obtention du spectre simulé qui servira à l'analyse, pour que la comparaison puisse être pertinente de manière sûre.

---

## V Premiers résultats

---

Cette section présente les premiers résultats obtenus avec un gaz d'argon. La figure 2.21 représente un des spectres obtenus en configuration parallèle, c'est-à-dire en mode non dispersif. La figure 2.22 représente un des spectres obtenus en configuration anti-parallèle, c'est-à-dire en mode dispersif.

Les analyses préliminaires de la raie M1  $1s2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon montrent un certain décalage entre la valeur expérimentale et la valeur théorique [ARTEMYEV ET AL. 2005]. Les différentes valeurs trouvées varient en fonction de la position du système par rapport à la source de 3104,06 à 3104,23 eV, à comparer à une valeur théorique de  $3104,1483 \pm 0,0005$  eV.

D'autre part, les analyses préliminaires des transitions lithiumoïdes  $1s2s2p\ ^2P_{1/2,3/2} \rightarrow 1s^22s\ ^2S_{1/2}$  montrent également un certain décalage entre les valeurs des énergies trouvées à l'aide du spectromètre à cristal courbe décrit au chapitre 1. Ces décalages ne sont pas corrélés à ceux observés pour la transition  $1s2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ . On a notamment observé des décalages de signes opposés pour les lithiumoïdes et l'héliumoïde, ce qui signifie que les désaccords ne proviennent pas principalement d'un mauvais alignement du spectromètre. En effet, un désalignement décale l'ensemble du spectre soit vers les hautes énergies soit vers les basses énergies.

Le fait que les valeurs trouvées changent en fonction de l'orientation du spectromètre par rapport à la source indiquerait une mauvaise prise en compte des paramètres géométriques de la source. Cependant, le programme de simulation nécessaire à l'analyse des spectres étant en cours de développement, il est toujours trop tôt pour interpréter les résultats.

Il sera utile de comparer les écarts en énergie des différentes transitions obtenues avec le spectromètre à cristal courbe et ceux obtenus à l'aide du spectromètre à deux cristaux plans.

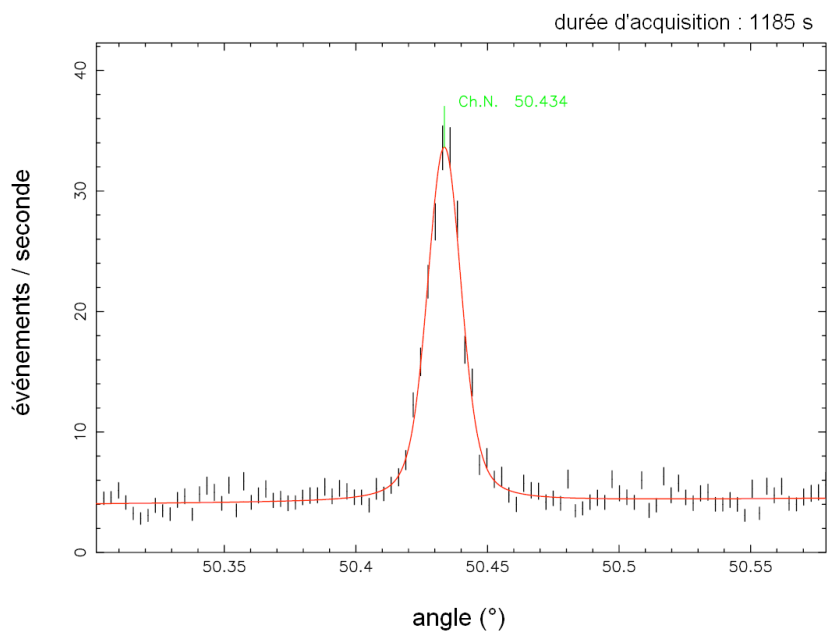


Fig. 2.21 – Spectre obtenu en mode non dispersif, où les cristaux sont parallèles. Cela représente la fonction de réponse du spectromètre et sert à étalonner les positions angulaires relatives des cristaux.

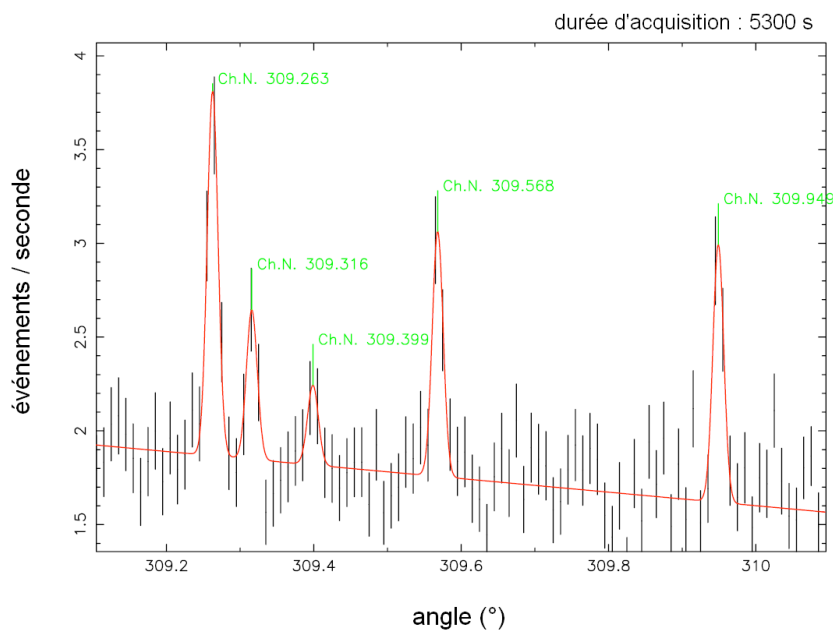


Fig. 2.22 – Spectre obtenu en mode dispersif, où les cristaux sont en configuration anti-parallèle.



Deuxième partie

THÉORIE



## Chapitre 3

---

# Corrections électromagnétiques aux niveaux d'énergie de l'hydrogène pionique, pour l'exploitation de spectres obtenus à l'institut Paul Scherrer

---

### I Introduction

---

L'hydrogène pionique est un atome exotique constitué d'un pion et d'un proton. Le pion, tout comme le proton, est composé de quarks. Les quarks d'une des particules peuvent interagir avec ceux de l'autre particule via l'interaction forte, ce qui décale les niveaux d'énergie de l'atome. Les théories relatives à l'interaction forte qui tentent de prévoir ces décalages font intervenir des grandeurs physiques, les longueurs de diffusion hadroniques, que l'on cherche à connaître avec une meilleure précision. Utiliser le spectre d'émission de photons de l'hydrogène pionique permet de déduire les valeurs de ses grandeurs physiques, et de vérifier la justesse des prévisions des théories relatives à l'interaction forte sur l'ensemble des systèmes y étant sujets. Grâce aux expériences de spectroscopie que notre équipe<sup>1</sup> a réalisé à l'Institut Paul Scherrer (PSI) en Suisse à l'aide du spectromètre présenté au chapitre 1, on dispose de valeurs expérimentales pour les niveaux d'énergie de l'hydrogène pionique. Les transitions concernées sont :  $2p \rightarrow 1s$ ,  $3p \rightarrow 1s$ ,  $4p \rightarrow 1s$ . Chaque niveau d'énergie observé est, en très bonne approximation, la somme des effets dus à l'interaction électromagnétique et de ceux dus à l'interaction forte. On peut donc estimer la contribution de l'interaction forte à l'énergie

---

1. Notre équipe fait parti d'une collaboration composée de différents groupes européens, voir [GOTTA ET AL. 2008] par exemple.

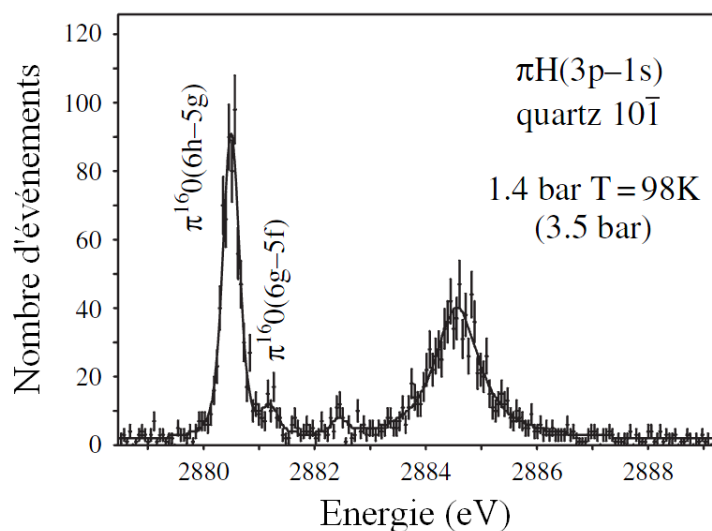


Fig. 3.1

totale en soustrayant la part due à l'interaction électromagnétique. Il est donc crucial d'avoir une estimation de l'ordre du ppm de la contribution électromagnétique ; c'est le but du travail présenté ici.

### I-1 L'expérience

Comme nous venons de l'évoquer, les valeurs expérimentales pour les transitions que nous étudions sont obtenues à l'aide du spectromètre à cristal courbe que nous avons présenté au chapitre 1. Le spectromètre est situé à quelques mètres d'un l'accélérateur de particules à l'Institut Paul Scherrer (PSI). Des protons sont suffisamment accélérés pour se désintégrer en pions lors de leur impact sur une cible de carbone. Le faisceau de pions ainsi produit est dirigé sur la source ECR ; grâce au champ magnétique créé par les bobines supraconductrices (voir la description de la source au paragraphe III-2-1) les pions sont dirigés sur une cellule de gaz contenant par exemple de l'hydrogène et de l'oxygène. Les pions, lourds, viennent remplacer les électrons des atomes pour former par exemple de l'hydrogène pionique ou de l'oxygène pionique. Les atomes ainsi formés sont fortement excités et se dés excitent en émettant des photons ; parmi les transitions opérées on trouve celles que nous allons étudier. La figure 3.1 montre un exemple de spectre obtenu.

Sur l'exemple représenté par la figure 3.1, la transition  $3p \rightarrow 1s$  est mesurée en utilisant une raie de calibration : la transition  $6h \rightarrow 5g$  de l'oxygène pionique qui est affectée par l'interaction forte de façon négligeable étant donnée qu'elle concerne des niveaux de moment orbital non nul (les particules sont en moyenne trop éloignées l'une de l'autre pour que l'interaction forte qui a une portée courte ne puisse intervenir). La précision de l'expérience pour cette transition est de l'ordre de 12 meV, soit 4 ppm [GOTTA 2004 ; GOTTA ET AL. 2008].

---

## II Motivations théoriques en amont : interaction forte

---

---

### II-1 Présentation du domaine

Les atomes ordinaires que l'on trouve partout dans la nature sont constitués d'électrons légers orbitant autour d'un noyau lourd formé de protons et de neutrons. C'est ce type de système qui a été le plus étudié. Pour les atomes à deux corps, un noyau et un électron, les valeurs des niveaux d'énergie discrets ont été d'abord données par les solutions de l'équation de Schrödinger qui modélise le système par un électron mobile dans le champ d'un noyau infiniment lourd, c'est-à-dire fixe, et ponctuel. En incluant le caractère relativiste des électrons au problème, Dirac [DIRAC 1928a,b], abouti à l'équation du même nom valable pour les particules de spin  $\frac{1}{2}$  (fermions) et prévoit l'existence de l'antiparticule de l'électron, le positron. L'équation équivalente permettant de modéliser un système constitué d'un noyau et d'une particule satellite de spin nul (boson), est l'équation de Klein-Gordon [KLEIN 1926 ; GORDON 1926 ; FOCK 1926]. Pour les atomes à plusieurs électrons, on ne dispose pas d'équation donnant des solutions exactes, alors on tient compte des interactions entre électrons en les considérant comme des perturbations.

Cependant, le décalage des niveaux de l'hydrogène par rapport à ceux prévus par l'équation de Dirac observé par Lamb en 1947 [LAMB and RETHERFORD 1947, 1950] a révélé qu'il fallait aller plus loin. L'observation expérimentale fut expliquée grâce à l'introduction de la quantification des champs qui permet d'inclure l'influence des « fluctuations quantiques du vide » sur les niveaux d'énergie. Cela correspond à l'omniprésence des phénomènes de création et annihilation de particules (photons ou électrons par exemple) dites virtuelles. Bien que le nombre de particules réelles ne change finalement pas, tenir compte des fluctuations du vide est indispensable pour expliquer les niveaux d'énergie. Ceci a abouti à l'avènement de l'électrodynamique quantique, ou QED. Parmi les phénomènes issus de ces fluctuations, la self-énergie (issue des fluctuations du champ photonique) et la polarisation du vide (issue des fluctuations du champ électronique) sont ceux qui sont les plus importants. La self-énergie désigne le phénomène selon lequel une particule émet et réabsorbe des photons virtuels. La polarisation du vide quant à elle correspond au fait que les paires virtuelles {électrons, positrons} qui se créent puis s'annihilent en permanence à partir du vide se polarisent à cause du champ électromagnétique créé par les particules de l'atome. Ces phénomènes sont représentés par les diagrammes de Feynman, où chaque segment représente une particule se propageant. Les règles de Feynman qui y sont associées traduisent ces diagrammes en termes mathématiques en faisant par exemple correspondre aux segments les propagateurs des particules. Calculer la contribution aux énergies de tels phénomènes, revient à intégrer ces expressions sur toutes les valeurs possibles que peuvent prendre chaque paramètre libre, tel que par exemple le vecteur d'onde d'une particule. Ces intégrales pouvant être divergentes, il fut indispensable de renormaliser, c'est-à-dire de



faire coïncider ces calculs théoriques avec la réalité où les grandeurs sont finies. On s'appuie pour ce faire sur les constantes expérimentales comme la masse ou la charge. A titre d'exemple, considérons la polarisation du vide : les paires virtuelles polarisées entre les particules de l'atome ont pour effet de modifier le champ perçu par ces particules. Cela signifie que la charge mesurée expérimentalement de toute particule n'est pas la charge « nue », mais la charge apparente, modifiée par le vide. Les parties infinies des intégrales sont incluses dans la charge « nue », on obtient alors une théorie renormalisable, c'est-à-dire finie et faisant intervenir les grandeurs observables.

## II-2 L'hydrogène pionique : interaction électromagnétique et interaction forte

L'hydrogène pionique est constitué d'un proton  $p$  et d'un pion de charge négative  $\pi^-$ . Ce système est principalement gouverné par l'interaction électromagnétique. Cependant, le pion est une particule composite associant un antiquark up et un quark down, il est donc d'une part de taille finie et est d'autre part sujet à l'interaction forte, ce qui a pour conséquence de décaler les niveaux d'énergie par rapport à ceux d'un système dont les particules n'interagiraient que par la force électromagnétique. Pour le niveau fondamental  $1s$ , ce décalage est noté  $\epsilon_{1s}$ .

L'hydrogène pionique est instable : sa durée de vie est d'environ  $10^{-15}$  s, ce qui élargit les niveaux d'énergie occupés par l'atome. Pour le niveau fondamental  $1s$ , l'élargissement est noté  $\Gamma_{1s}$ . La durée de vie de l'atome est d'autre part beaucoup plus courte que la durée de vie environ égale à  $10^{-8}$  s du pion lui-même, qui est donc considéré comme stable en tant que constituant de l'atome. Outre la diffusion élastique  $\pi^- p \rightarrow \pi^- p$ , l'hydrogène pionique peut se transformer de différentes façons. Par exemple par échange de charge :  $\pi^- p \rightarrow \pi^0 n$ , ou par radiation :  $\pi^- p \rightarrow \gamma n$  où  $\pi^0$  est le pion de charge nulle,  $n$  le neutron,  $\gamma$  le photon. C'est dans ces phénomènes qu'interviennent les longueurs de diffusion hadroniques que l'on cherche à déterminer.

Le pion est un boson de spin nul, c'est donc une particule dont la fonction d'onde vérifie l'équation de Klein-Gordon, contrairement, on le rappelle, aux fermions comme l'électron qui vérifient l'équation de Dirac. Sa masse<sup>1</sup> d'environ  $139,6 \text{ MeV}/c^2$  est seulement 6,7 fois moins importante que celle du proton ( $938,3 \text{ MeV}/c^2$ ) mais 274 fois plus importante que celle de l'électron ( $0,5 \text{ MeV}/c^2$ ). On ne peut pas considérer le proton comme un noyau immobile autour duquel orbiterait le pion, comme ce serait le cas si l'on utilisait l'équation de Klein-Gordon pour modéliser le pion dans le champ du noyau. Il faut considérer les particules sur un même plan, toutes deux orbitant dans un mouvement réciproque. Pour tenir compte de ces effets de recul, nous avons choisi d'utiliser le Hamiltonien de l'interaction de Breit-Pauli [BERESTETSKII ET AL. 1982 ; BETHE and SALPETER 1957] valable dans notre cas où le système est faiblement relativiste<sup>2</sup> et une fonction d'onde non relativiste solution de l'équation de Schrödinger

1. On exprime la masse en terme d'énergie grâce à la relation  $E = mc^2$ .

2. D'après le modèle de Bohr,  $v \approx \frac{Z}{n\hbar} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{Z\alpha c}{n}$  où  $n$  est le nombre quantique principal,  $\epsilon_0 \simeq 8,9 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{J}/\text{m}$  est la permittivité du vide,  $e \simeq 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$  est la charge élémentaire,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  où

[BETHE and SALPETER 1957], dans laquelle intervient la masse réduite du système. Sont alors ajoutées les corrections dues à la polarisation du vide dont la contribution est beaucoup plus importante que dans le cas des atomes électroniques (voir par exemple [EIDES ET AL. 2001, § 9.1.1.1]), à la taille finie des particules et d'autres corrections radiatives de self-énergie et de recul.

Les précédentes études des niveaux d'énergie de l'hydrogène pionique [SIGG ET AL. 1996 ; LYUBOVITSKIY and RUSSETSKY 2000] se basent sur des approches différentes ; nous les détaillerons à la fin du chapitre (IV-2).

D'autre part, la taille caractéristique de ce système est représentée par le rayon de Bohr<sup>1</sup> :  $r_B = \frac{\hbar}{c} \frac{1}{Z\alpha\mu} \simeq 222 \text{ fm}$  où  $\alpha \simeq 1/137$  est la constante de structure fine et  $\mu = \frac{m_p m_{\pi^-}}{m_p + m_{\pi^-}}$  la masse réduite qui est environ 240 fois plus petite que celle de l'hydrogène électronique. Notons que ceci a pour conséquence d'amplifier l'importance de la polarisation du vide par rapport au cas de l'hydrogène électronique. La taille caractéristique de l'atome reste néanmoins beaucoup plus grande que la distance de portée de l'interaction forte qui est environ de quelques fm, ce qui signifie que l'hydrogène pionique est malgré tout majoritairement gouverné par l'interaction électromagnétique :

$$E_n \simeq m_{\pi^-} + m_p - \frac{\mu(Z\alpha)^2}{2n^2} + O(\alpha^3), \quad (3.1)$$

où l'énergie  $E_n$  est développée en série de  $\alpha$ , et  $Z$  est le nombre de charge du noyau, c'est-à-dire ici égal à 1. Le terme en  $\alpha^2$  est dû à la loi de Coulomb, le terme suivant en  $\alpha^3$  est uniquement relatif à l'interaction forte (on verra au cours du chapitre qu'il n'y a pas de terme en  $\alpha^3$  dans la contribution électromagnétique à l'énergie). Dans l'équation qui précède, on utilise le système d'unité où  $\hbar = c = 1$ , ainsi que dans la suite de ce chapitre.

Les valeurs des énergies des niveaux atomiques sont négligeables par rapport au domaine d'action caractéristique de l'interaction forte. Ainsi l'atome peut être utilisé pour étudier la diffusion de  $\pi^- p$  à basse énergie. Or les longueurs de diffusion qui sont les grandeurs que nous recherchons, sont des paramètres qui s'obtiennent à basse énergie. A basse énergie le système ne porte pas la signature de la structure interne de ces constituants. De manière schématique, la longueur d'onde des particules est très grande par rapport à la structure interne et la diffusion ne peut résoudre leurs détails. En d'autres termes, les mesures ne donnent pas d'information sur la région interne des interactions fortes pion-proton. Seuls les effets des interactions reliées à la diffusion à basse énergie comme les longueurs de diffusion sont présents dans l'expression de l'énergie.

La première équation reliant les longueurs de diffusion à l'énergie fut donnée par [DESER ET AL. 1954]. Au seuil, c'est-à-dire à basse énergie, on a :

$$\frac{\epsilon_{1s}}{E_{1s}} = -4 \frac{a_{\pi^- p \rightarrow \pi^- p}}{r_B} (1 + \delta_\epsilon) ; \quad (3.2)$$

---

$h \simeq 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$  est la constante de planck,  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c 4\pi\epsilon_0}$  la constante de structure fine. Pour  $Z$  petit, les atomes ont un caractère faiblement relativiste.

1.  $r_B = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{\mu e^2}$

$$\frac{\Gamma_{1s}}{E_{1s}} = 8 \frac{q_0}{r_B} \left(1 + \frac{1}{P}\right) \left(a_{\pi^- p \rightarrow \pi^0 n} (1 + \delta_\Gamma)\right)^2, \quad (3.3)$$

où  $a_{\pi^- p \rightarrow \pi^- p}$  et  $a_{\pi^- p \rightarrow \pi^0 n}$  sont les longueurs de diffusion reliées aux réactions correspondantes, et qui sont définies comme combinaisons linéaires des longueurs de diffusion d'isospin : voir par exemple [GASSER ET AL. 2008 ; GOTTA ET AL. 2008] ;  $q_0$  est la quantité de mouvement relative du système  $\pi^0 n$  après la réaction, et qui dépend des constantes du problème,  $P$  est le rapport de Panofsky des taux de désintégration entre les réactions  $\pi^- p \rightarrow \pi^0 n$  et  $\pi^- p \rightarrow \gamma n$ .

$\delta_\epsilon$  et  $\delta_\Gamma$  sont des termes correctifs dont la valeur (et le sens physique) changent, en fonction de la théorie relative à l'interaction forte utilisée. En effet, différents groupes de théoriciens ont perfectionné cette formule : théorie du potentiel effectif [SIGG ET AL. 1996], théorie des perturbations chirales basée sur un Hamiltonien effectif QED+QCD [LYUBOVITSKIY and RUSITSKY 2000 ; GASSER ET AL. 2008], ou encore d'autres approches phénoménologiques [ERICSON ET AL. 2004].

Nous n'allons pas entrer dans les détails de ces théories mais simplement nous limiter à décrire les points utiles à nos calculs qui se bornent à l'interaction électromagnétique. Une comparaison des approches et des résultats est abordée dans [GASSER ET AL. 2008]. Les différences auxquelles ils aboutissent n'ont pas de conséquence sur nos calculs. Il faut simplement retenir que les différentes expressions reliant l'énergie de l'atome aux longueurs de diffusion auxquelles ils aboutissent ne portent que sur des termes d'ordres inférieurs ou égaux à  $O(\alpha^4)$  du développement de l'énergie. Or notre objectif est de calculer la contribution à l'énergie de l'interaction électromagnétique dans le but d'extraire les longueurs de diffusion, à partir de la relation qui existe entre niveau d'énergie et longueurs de diffusion. Le fait que cette relation n'aille que jusqu'à l'ordre  $O(\alpha^4)$ , implique que la longueur de diffusion mesurée qui est définie grâce à cette relation, et qui est tout de même proche de la longueur de diffusion réelle, inclut les interactions électromagnétiques des ordres supérieurs.

Il faudrait donc s'arrêter à l'ordre  $O(\alpha^4)$  dans les calculs de la contribution électromagnétique. Cependant, on peut en pratique aller un peu plus loin (III-4) en calculant certains termes constitutifs de phénomènes reliés à l'interaction électromagnétique en  $O(\alpha^5)$ , lorsqu'ils proviennent de régions du domaine d'intégration qui n'ont pas de recouvrement avec la région où les interactions fortes ont lieu.

---

### III Calculs

---

Pour calculer la contribution aux niveaux d'énergie de l'hydrogène pionique due à l'interaction électromagnétique, on va utiliser l'approche suivie par K. Pachucki pour le calcul du déplacement de Lamb  $2p \rightarrow 2s$  dans l'hydrogène muonique [PACHUCKI 1996], qui est également un système composé de deux particules ayant des masses assez proches. Cependant, le muon présente des différences avec le pion : c'est une particule élémentaire, donc ponctuelle, et de spin 1/2. Nous avons utilisé certains des programmes de calcul formel écrits à l'occasion de cet article. Il a fallu généraliser les

calculs aux niveaux d'énergie qui nous concernent et bien sûr modifier les expressions à calculer en fonction des différences existantes entre les deux systèmes (spin, taille finie du pion, ...).

Toutes les formules présentées sont valables pour tous les états d'un système constitué d'un boson et d'un fermion, de masses proches. Ces calculs sont appliqués aux transitions  $2p_{\frac{1}{2},\frac{3}{2}} \rightarrow 1s$ ,  $3p_{\frac{1}{2},\frac{3}{2}} \rightarrow 1s$ ,  $4p_{\frac{1}{2},\frac{3}{2}} \rightarrow 1s$ , qui ont été expérimentalement observées à l'Institut Paul Scherrer par notre équipe. On va traiter le problème en utilisant le Hamiltonien de l'interaction de Breit-Pauli, où l'on a une dépendance en masse exacte. On y inclut l'anomalie du moment magnétique du proton. On obtient alors la correction relativiste principale. On va ensuite calculer la correction due à la polarisation du vide au premier ordre. Puis on va calculer la correction relativiste à la polarisation du vide. On va également calculer la polarisation du vide à deux boucles, et la polarisation du vide à l'ordre deux. On va calculer les effets de taille finie des particules : le terme principal, et les effets associés à la polarisation du vide. On va calculer les self-énergies des particules, et la correction dite de recul due à l'échange de deux photons, souvent désignée par « correction de Salpeter » [SALPETER 1952]. Enfin, on va tenir compte de la correction de recul de l'atome lorsqu'il émet un photon. La précision de nos calculs est limitée par celle de la masse du pion, et par l'incertitude sur les rayons du pion et du proton. Les valeurs numériques utilisées sont tirées de [MOHR ET AL. 2008] :

$$\begin{aligned} h &= 4.13566733(10) \cdot 10^{-15} \text{ eV s}, \\ c &= 299792458 \text{ m s}^{-1}, \\ r_p &= 0,8768(69) \text{ fm}, \\ m_p &= 938,272013(23) \text{ MeV}/c^2, \\ \alpha &= 7,2973525376(50) \cdot 10^{-3}, \\ \kappa &= (5,585694713(46) - 2)/2, \\ m_e &= 0,510998910(13) \text{ MeV}/c^2, \end{aligned}$$

ou [AMSLER ET AL. (PARTICLE DATA GROUP) 2008] :

$$\begin{aligned} m_{\pi^-} &= 139,57018(35) \text{ MeV}/c^2, \\ r_{\pi^-} &= 0,672(8) \text{ fm}, \end{aligned}$$

où les chiffres entre parenthèse représente l'incertitude sur les derniers chiffres ; ces grandeurs seront définies au fil du texte.

---

### III-1 Hamiltonien de l'interaction de Breit-Pauli

Le Hamiltonien de Breit-Pauli correspondant à notre système est :

$$H_{BP} = H_0 + \delta H + V^{BP}, \quad (3.4)$$

avec :

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{Z\alpha}{r}, \quad (3.5)$$

$$\delta H = -\frac{\mathbf{p}^4}{8m_p^3} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_{\pi^-}^3}, \quad (3.6)$$

$$V^{\text{BP}} = \frac{\pi Z\alpha}{2} \frac{1}{m_p^2} \delta^3(r) - \frac{Z\alpha}{2m_p m_{\pi^-}} p^i \frac{1}{r} \left( \delta_{ij} + \frac{r_i r_j}{r^2} \right) p^j + \frac{Z\alpha}{r^3} \left( \frac{1+2\kappa}{4m_p^2} + \frac{1+\kappa}{2m_p m_{\pi^-}} \right) (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.7)$$

où  $m_p$ ,  $m_{\pi^-}$  désignent respectivement les masses du proton et du pion,  $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_{\pi^-}}$  est la masse réduite du système, et  $\kappa$  l'anomalie du moment magnétique du proton,  $\boldsymbol{\sigma}$  sont les matrices de Pauli,  $i, j = 1, 2, 3$ , et les termes de  $V^{\text{BP}}$  et  $\delta H$  sont en  $1/c^2$ . Dans notre cas le nombre de charge du noyau est  $Z = 1$  cependant on choisit de conserver  $Z$  dans les équations afin de pouvoir distinguer la charge du proton de celle du pion.

Le cheminement qui permet d'obtenir le Hamiltonien de Breit-Pauli est développé dans [BERESTETSKII ET AL. 1982, § 83], ainsi que dans [BARKER and GLOVER 1955] où sont aussi données terme par terme les contributions à l'énergie correspondantes. Ce travail est effectué dans le cas général, et il suffit de l'adapter à notre situation. D'après [PACHUCKI 1995a], le Hamiltonien ne comporte pas de terme de Darwin correspondant au pion. Ce résultat avait par ailleurs été obtenu [OWEN 1994]<sup>1</sup> pour un système spin 0-spin 1/2.

Cependant, il existe une différence entre notre expression pour  $V^{\text{BP}}$  3.7 et celles des références ultérieures [BARKER and GLOVER 1955 ; OWEN 1994 ; LYUBOVITSKIJ and RUSSETSKY 2000 ; TRASSINELLI 2005]. En effet, le premier terme de 3.7 relatif au terme de Darwin ne contient pas  $\kappa$ . Si l'on suivait le résultat de [BARKER and GLOVER 1955] par exemple, ce terme serait égal à :

$$\frac{\pi Z\alpha}{2} \frac{(1+2\kappa)}{m_p^2} \delta^3(r) \quad (3.8)$$

Pourquoi une telle différence? Nous verrons plus loin (§ III-3) que le rayon des particules doit être pris en compte : la taille finie des particules entraîne un décalage des niveaux d'énergie. Or cette grandeur physique est mesurée expérimentalement, et contient, par le biais de sa définition, la contribution à l'énergie issue du terme qui est absent de notre Hamiltonien [KHRIPLOVICH ET AL. 1996 ; FRIAR ET AL. 1997 ; PACHUCKI 2008]. C'est dans le but ne pas compter deux fois cette contribution que le terme de Darwin ne contient pas  $\kappa$ . Nous reviendrons en détails sur ce point dans le paragraphe III-3-1.a.

1. On trouve une erreur dans l'expression de l'énergie correspondante au Hamiltonien dans [OWEN 1994, eq. (6.1)] : il faut remplacer le facteur  $\frac{1-\delta_{0l}}{(l+1)} \left( \frac{\theta_{j-(l+1/2)}}{2l+1} - \frac{\theta_{j-(l-1/2)}}{l} \right)$  par  $\frac{1-\delta_{0l}}{(2l+1)} \left( \frac{\theta_{j-(l+1/2)}}{l+1} - \frac{\theta_{j-(l-1/2)}}{l} \right)$ .

Nous pouvons également préciser qu'au regard de la démonstration effectuée dans [FRIAR ET AL. 1997], le terme de Darwin pourrait de manière alternative, être lui aussi incorporé dans la définition du rayon de la charge.

Les termes  $\delta H$  et  $V^{\text{BP}}$  sont considérés comme des perturbations de  $H_0$ , on moyenne le Hamiltonien sur la fonction d'onde du système  $|\phi_{n,l}\rangle$ , état propre de  $H_0$ , où  $n$  est le nombre quantique principal et  $l$  le moment angulaire. Au premier ordre du développement en perturbation (suffisant pour notre précision), l'expression de l'énergie  $\langle \phi_{n,l} | H_{\text{BP}} | \phi_{n,l} \rangle$  est :

$$E^{H_0} = -\frac{\mu(Z\alpha)^2}{2n^2}, \quad (3.9)$$

$$E^{\delta H} = -\frac{\mu^4(Z\alpha)^4}{2n^4} \left( \frac{1}{m_p^3} + \frac{1}{m_{\pi^-}^3} \right) \left( \frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right), \quad (3.10)$$

$$E^{V^{\text{BP}}} = \frac{\mu^3(Z\alpha)^4}{n^3} \left[ \frac{1}{2m_p^2} \delta_{0l} + \frac{1}{m_p m_{\pi^-}} \left( \frac{1}{n} - \frac{3}{2(l+1/2)} + \delta_{0l} \right) + \left( \frac{(1+2\kappa)}{2m_p^2} + \frac{(1+\kappa)}{m_p m_{\pi^-}} \right) \left\{ \frac{(1-\delta_{0l})}{(2l+1)} \left( \frac{\theta[F-(l+1/2)]}{l+1} - \frac{\theta[F-(l-1/2)]}{l} \right) \right\} \right], \quad (3.11)$$

où  $F$  est le moment cinétique total (issu de la composition du moment angulaire et du moment magnétique (spin) du proton),  $\theta$  est la fonction de Heaviside. Les trois termes entre crochets de 3.11 sont placés dans le même ordre que les trois termes du Hamiltonien 3.7 dont ils découlent<sup>1</sup>.

On trouve par exemple :

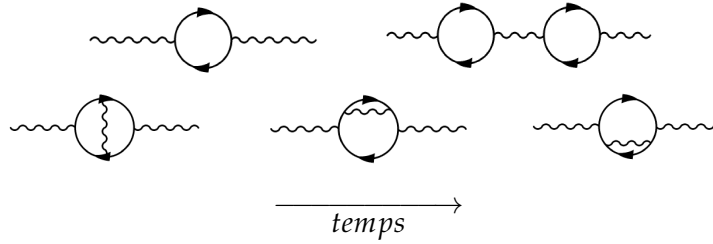
$$E_{2p \rightarrow 1s}^{H_0} = 2426208,6(53) \text{ meV}, \quad (3.12)$$

et

$$E^{\delta H} + E_{2p_{1/2} \rightarrow 1s}^{V^{\text{BP}}} = 176,94850(33) \text{ meV}. \quad (3.13)$$

Les chiffres entre parenthèses correspondent à l'incertitude sur les derniers chiffres de la valeur, et sont dus à l'incertitude sur la masse du pion qui domine largement. Les valeurs des autres transitions sont recueillies dans le tableau 3.3 de la sous-section IV-1.

1. Pour trouver ces expressions, il était plus commode de résoudre directement  $\langle \phi_{n,l} | H_{\text{BP}} | \phi_{n,l} \rangle$  plutôt que de se servir des expressions publiés, ce qui a permis d'ailleurs d'identifier l'erreur de l'eq. 6.1 de [OWEN 1994].



**Fig. 3.2** – Exemple d'insertion de paires {électron-positron} dans le propagateur photonique. Les diagrammes de la ligne supérieure sont dits à une boucle, ceux de la ligne inférieure sont dits à deux boucles. Le positron se déplace en remontant le temps : il va de droite à gauche.

### III-2 Polarisation du vide

#### III-2-1 Polarisation du vide au premier ordre, à une boucle

Comme on l'a expliqué dans le paragraphe II-1, la polarisation du vide provient des fluctuations du vide pour le champ électronique. Des paires virtuelles {électron-positron} sont créées à partir du vide, elles se polarisent à cause du champ extérieur dû aux particules de l'atome, avant de s'annihiler. La modification de l'interaction effective entre les particules de l'atome équivaut à la modification du potentiel Coulombien. Les corrections au potentiel dues aux différents phénomènes (polarisation simple, double, et à deux boucles pour celles qui nous concernent) sont calculées à l'aide des diagrammes de Feynman. L'interaction entre deux particules chargées revient en QED à l'échange de photons. Ce sont les photons qui sont les particules médiatrices de la force électromagnétique (de la même manière que le sont les gluons vis-à-vis de l'interaction forte par exemple). En terme de calcul, on écrit cet échange sous la forme d'une fonction appelée "propagateur". Comme la polarisation du vide modifie le champ Coulombien, on peut imaginer de modifier le propagateur du photon afin d'y inclure l'effet de polarisation du vide sur l'interaction électromagnétique des charges. En terme de diagrammes, cela correspond au fait que l'on peut insérer des « bulles » formées de paires {électron-positron} dans la ligne du propagateur du photon. Quelques exemples sont illustrés par la figure 3.2.

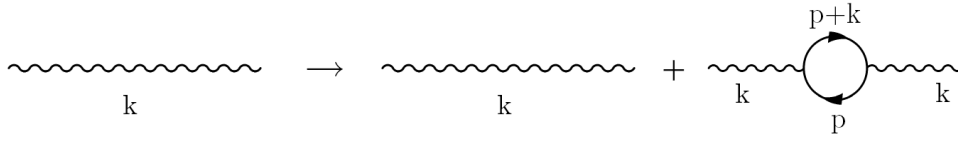
En tenant compte uniquement des diagrammes dits « à une boucle » du type de ceux de la ligne supérieure de la figure 3.2, le propagateur photonique <sup>1</sup> (renormalisé <sup>2</sup>)  $iD_{\mu\nu}(k)$  [ITZYKSON and ZUBER 1980, p.698], [PESKIN and SCHROEDER 1995, p.801], [BERESTETSKII ET AL. 1982], [GREINER 2003] est modifié de la manière suivante :

$$D_{\mu\nu}(k) = -g_{\mu\nu} \frac{4\pi}{k^2} \rightarrow D_{\mu\nu}^{\text{vp}}(k) = -g_{\mu\nu} \frac{4\pi}{k^2(1 + \bar{\omega}(k^2))}, \quad (3.14)$$

1. Seuls les termes ne dépendant pas de la jauge sont écrits, car ils sont les seuls à contribuer dans les diagrammes que nous allons calculer ([PESKIN and SCHROEDER 1995, § 7.5 p.246])

2. On considère ici que la renormalisation a déjà été effectuée et que les constantes physiques (charges, masses...) correspondent aux quantités observables.





**Fig. 3.3** – Approximation du propagateur photonique à l’ordre le plus bas.  $k$  est le quadrvecteur énergie-impulsion du photon,  $p+k$  celui de l’électron et  $p$  celui du positron.

où  $\bar{\omega}(k^2)$  est l’opérateur de polarisation renormalisé, et  $k$  est un 4-vecteur. Au premier ordre du développement en perturbation, cela correspond au remplacement suivant :

$$D_{\mu\nu}(k) = -g_{\mu\nu} \frac{4\pi}{k^2} \rightarrow D_{\mu\nu}^{\text{vp}}(k) = -g_{\mu\nu} \frac{4\pi}{k^2} (1 - \bar{\omega}(k^2)). \quad (3.15)$$

Ce qui en terme de diagramme correspond à la figure 3.3

Au premier ordre à une boucle,  $\bar{\omega}(k^2)$  est donné par [ITZYKSON and ZUBER 1980] :

$$\bar{\omega}(k^2) = \frac{\alpha}{\pi} k^2 \int_4^\infty d(q^2) \frac{1}{q^2(m_e^2 q^2 - k^2)} u(q^2), \quad (3.16)$$

où  $m_e$  est la masse de l’électron, et avec

$$u(q^2) = \frac{1}{3} \sqrt{1 - \frac{4}{q^2}} \left( 1 + \frac{2}{q^2} \right). \quad (3.17)$$

$\frac{q}{m_e}$  correspond physiquement à l’énergie du photon dans le lequel est inséré une paire {electron-positron} et correspond donc aussi, par conservation de l’énergie, à l’énergie totale de la paire. La bornes inférieure d’intégration est donnée par le fait que la valeur seuil pour  $\left(\frac{q}{m_e}\right)^2$  pour la production de paires {électron-positron} est  $4m_e^2$ , ( $2m_e$  pour  $q/m_e$ , l’énergie du photon).

Il résulte de cette modification du propagateur de photon un champ effectif. Le diagramme 3.4 que l’on veut calculer fait intervenir le potentiel Coulombien, statique et ponctuel, les corrections de recul et de taille finie des particules étant calculées par ailleurs. En posant (voir l’annexe I pour les détails)  $k^2 = -\mathbf{k}^2$  on applique la formule générale 3.16 au cas spécifique du potentiel Coulombien puis en passant de l’espace des impulsions à l’espace des coordonnées par transformée de Fourier (voir [ITZYKSON and ZUBER 1980, § 7.1.1]), on retrouve qu’au propagateur non modifié du photon correspond l’interaction Coulombienne :

$$-g_{\mu\nu} \frac{4\pi}{k^2} \rightarrow \frac{-Z\alpha}{r}. \quad (3.18)$$

De la même manière, la partie modifiée du propagateur :

$$g_{\mu\nu} \frac{4\pi}{k^2} \bar{\omega}(k^2) = g_{\mu\nu} 4\pi \frac{\alpha}{\pi} \int_4^\infty d(q^2) \frac{1}{q^2(m_e^2 q^2 - k^2)} u(q^2) \quad (3.19)$$

donne [PESKIN and SCHROEDER 1995, § 7.5 p.254], [ITZYKSON and ZUBER 1980, § 7-1-1 p.327], [BERESTETSKII ET AL. 1982, § 114] la correction à ajouter au potentiel Coulombien :



$$V_{\text{vp}}(r) = -\frac{Z\alpha}{r} \frac{\alpha}{\pi} \int_4^\infty \frac{d(q^2)}{q^2} e^{-m_e q r} u(q^2) . \quad (3.20)$$

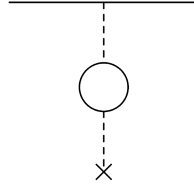


Fig. 3.4 – Diagramme de polarisation du vide au premier ordre à une boucle.

Le décalage en énergie correspondant à cette modification du potentiel est la moyenne sur la fonction d'onde :

$$E = \langle \phi_{n,l} | V_{\text{vp}} | \phi_{n,l} \rangle = \int d^3r V_{\text{vp}}(r) |\phi_{nl}(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty dr r^2 V_{\text{vp}}(r) R_{n,l}(r)^2 , \quad (3.21)$$

où  $\phi_{n,l}(\mathbf{r})$  est la fonction d'onde du système, solution de l'équation de Schrödinger [BETHE and SALPETER 1957] avec potentiel Coulombien, indépendante du temps et qui dépend de la masse réduite  $\mu$  :

$$\phi_{n,l}(\mathbf{r}) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) , \quad (3.22)$$

où  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  (où  $m$  est le nombre quantique magnétique) est l'harmonique sphérique, partie angulaire de la fonction d'onde.  $R_{n,l}(r)$  est la partie radiale [BETHE and SALPETER 1957],[EIDES ET AL. 2001, p.164] :

$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)! 2n}} \left( \frac{2Z\alpha\mu}{n} \right)^{(3/2)} \text{Exp} \left[ \frac{-Z\alpha\mu r}{n} \right] \left( \frac{2Z\alpha\mu r}{n} \right)^l F \left[ -(n-l-1), (2l+2), \frac{2Z\alpha\mu r}{n} \right] , \quad (3.23)$$

où  $F[a, b, x]$  est la fonction hypergéométrique conflente donnée par<sup>1</sup> :

$$F[a, b, x] = 1 + \frac{a}{b.1!} x + \frac{a(a+1)}{b(b+1).2!} x^2 + \dots . \quad (3.24)$$

Enfin, en introduisant l'expression de la correction au potentiel (3.20) dans l'équation (3.21), nous obtenons :

$$E = -(Z\alpha) \frac{\alpha}{\pi} \int_4^\infty \frac{d(q^2)}{q^2} u(q^2) \int dr e^{-m_e q r} r R_{n,l}^2(r) , \quad (3.25)$$

On utilise alors le programme de calcul formel Mathematica®, avec lequel on intègre l'expression analytiquement sur  $r$ , puis numériquement sur  $q$ .

1. Dans l'expression de la fonction d'onde, le premier paramètre ( $a$ ) de  $F$  étant négatif, la suite est finie.

On trouve par exemple :

$$E_{1s} = -3240,802(16) \text{ meV}, \quad (3.26)$$

$$E_{2p} = -35,79480(28) \text{ meV}, \quad (3.27)$$

$$E_{2p \rightarrow 1s} = 3205,007(15) \text{ meV}. \quad (3.28)$$

### III-2-2 Polarisation du vide muonique

De la même manière que dans le cas du champ électronique, des « bulles » muon-antimuon peuvent se former à partir du vide et induire un décalage des niveaux de l'atome. Pour le calculer, il suffit d'utiliser le résultat du paragraphe précédent III-2-1 en substituant la masse du muon à celle de l'électron.

On trouve par exemple :

$$E_{1s} = -0,2793061(19) \text{ meV}. \quad (3.29)$$

### III-2-3 Correction relativiste à la polarisation du vide

Nous allons à présent calculer la correction relativiste à la polarisation du vide, en associant les effets de l'interaction de Breit-Pauli et de la polarisation du vide.

Les relations de dispersion [BERESTETSKII ET AL. 1982, § 111] permettent d'assimiler l'expression de l'opérateur de polarisation à l'échange d'un photon de masse<sup>1</sup>  $q = m_e q$ .

On va remplacer la partie du potentiel d'interaction  $-\frac{Z\alpha}{r} e^{-m_e q r}$  dépendante de  $r$  dans l'expression 3.20, par une interaction de Breit-Pauli. Celle-ci est modifiée par rapport à l'expression 3.7, par le fait que c'est le potentiel  $\tilde{V} = -\frac{Z\alpha}{r} e^{-m_e q r}$  et non  $-\frac{Z\alpha}{r}$  qui a été utilisé pour établir son expression<sup>2</sup>. On obtient alors l'expression analogue à 3.20 incorporant l'interaction de Breit-Pauli, à intégrer sur la variable  $q$  ce qui équivaut à intégrer sur  $q$  :

$$V_{\text{VP}}^{\text{BP}}(r) = \frac{\alpha}{\pi} \int_4^\infty \frac{d(q^2)}{q^2} \mathcal{V}_{\text{VP}}^{\text{BP}}(r) u\left(\frac{q^2}{m_e^2}\right), \quad (3.30)$$

où  $\mathcal{V}_{\text{VP}}^{\text{BP}}(r)$  a pour expression :

1. On peut voir en observant la partie dépendante de  $r$  dans  $V_{\text{VP}}(r)$  3.20, c'est-à-dire  $-\frac{Z\alpha}{r} e^{-m_e q r}$  la similitude avec l'expression du potentiel de Yukawa [PESKIN and SCHROEDER 1995, § 4.7] correspondant à l'échange de bosons massifs.

2. Plus précisément, pour établir l'expression de l'interaction de Breit-Pauli modifiée, on suit la procédure décrite dans [BERESTETSKII ET AL. 1982, § 83] qui permet d'obtenir le Hamiltonien de Breit-Pauli, mais on utilise le propagateur du photon modifié  $\frac{4\pi}{k^2 + (m_e q)^2}$  correspondant à  $-\frac{Z\alpha}{r} e^{-m_e q r}$  à la place du propagateur du photon  $\frac{4\pi}{k^2}$  correspondant à  $-\frac{Z\alpha}{r}$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\text{vp}}^{\text{BP}}(r) = & \frac{Z\alpha}{8} \left( \frac{1+2\kappa}{m_p^2} \right) \left( 4\pi\delta^3(r) - \frac{q^2}{r} e^{-qr} \right) \\ & - \frac{Z\alpha}{4m_p m_{\pi^-}} \frac{q^2 e^{-qr}}{r} \left( 1 - \frac{qr}{2} \right) - \frac{Z\alpha}{2m_p m_{\pi^-}} p^i \frac{e^{-qr}}{r} \left( \delta_{ij} + \frac{r_i r_j}{r^2} (1+qr) \right) p^j \\ & + \frac{Z\alpha}{r^3} \left( \frac{1+2\kappa}{4m_p^2} + \frac{1+\kappa}{2m_p m_{\pi^-}} \right) e^{-qr} (1+qr) (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} . \end{aligned} \quad (3.31)$$

Le Hamiltonien total est la somme de  $H_{\text{BP}} = H_0 + \delta H + V^{\text{BP}}$  3.4, de la polarisation du vide  $V_{\text{vp}}$  3.20 et de  $V_{\text{vp}}^{\text{BP}}$  :

$$H_{\text{tot}} = H_0 + \delta H + V^{\text{BP}} + V_{\text{vp}} + V_{\text{vp}}^{\text{BP}} = H_0 + W . \quad (3.32)$$

On opère alors le développement en perturbation en  $W$  jusqu'au deuxième ordre, dont les détails sont donnés dans la section II de l'annexe, et l'on ne conserve que les termes dominants et qui n'ont pas déjà été calculés, et qui entrent dans le cadre de cette correction. On obtient alors une contribution à l'énergie :

$$E = \frac{\alpha}{\pi} \int_4^\infty \frac{d(q^2)}{q^2} u \left( \frac{q^2}{m_e^2} \right) E(q) , \quad (3.33)$$

où

$$E(q) = \langle \phi_{n,l} | \mathcal{V}_{\text{vp}}^{\text{BP}} | \phi_{n,l} \rangle + 2 \langle \phi_{n,l} | (\delta H + V^{\text{BP}}) \frac{1}{(E_{n,l}^0 - H_0)'} \tilde{V} | \phi_{n,l} \rangle . \quad (3.34)$$

Les termes de matrice de la fonction de Green Coulombienne réduite  $G'_{n,l}(r, r') = \langle r | \frac{1}{(E_{n,l}^0 - H_0)'} | r' \rangle$  sont calculés de la même manière<sup>1</sup> que dans [PACHUCKI 1996].

Cette correction correspond aux diagrammes de la figure 3.5. Le premier terme issu de 3.34 correspond au diagramme de gauche où est représenté l'échange d'un photon dans lequel est insérée une paire électron-positron. Le deuxième terme correspond à l'interaction de Breit-Pauli suivie de l'interaction Coulombienne modifiée par la polarisation du vide :



Fig. 3.5 – Diagrammes de la correction relativiste à la polarisation du vide.

On trouve par exemple :

1. On a réutilisé le programme écrit par K. Pachucki à l'occasion de l'article [PACHUCKI 1996].

$$E_{1s} = -0,4324798(20) \text{ meV}, \quad (3.35)$$

$$E_{2p_{1/2}} = -0,02642592(14) \text{ meV}, \quad (3.36)$$

$$E_{2p_{1/2} \rightarrow 1s} = 0,4060539(19) \text{ meV}. \quad (3.37)$$

### III-2-4 Polarisation du vide au second ordre

Cette correction est représentée par les diagrammes de la figure 3.6.

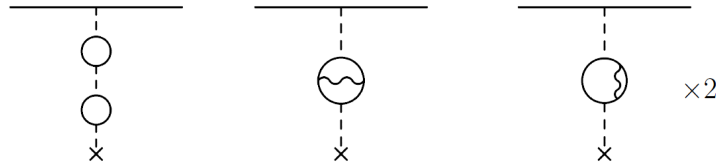


Fig. 3.6 – Diagrammes de polarisation du vide à deux boucles.

Elle rassemble les effets du deuxième diagramme de la première ligne de la figure 3.2, et des diagrammes de la deuxième ligne.

De la même manière que pour la polarisation du vide au premier ordre (III-2-1), on utilise un propagateur de photon modifié :

$$\bar{\omega}^{(2)}(-\mathbf{p}^2) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^2 (-\mathbf{p}^2) \int_4^\infty d(q^2) \frac{1}{q^2(m_e^2 q^2 + \mathbf{p}^2)} u^{(2)}(q^2), \quad (3.38)$$

où le potentiel  $u^{(2)}(q^2)$  est donné par [KÄLLÉN and SABRY 1955, eq.(49)].

Le décalage en énergie est, de la même manière que pour le terme principal :

$$E = \langle \phi_{n,l} | V_{\text{vp}}^{(2)}(r) | \phi_{n,l} \rangle = \int d^3r V_{\text{vp}}^{(2)}(r) |\phi_{n,l}(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty dr r^2 V_{\text{vp}}^{(2)}(r) R_{n,l}(r)^2, \quad (3.39)$$

où  $V_{\text{vp}}^{(2)}(r)$  est le nouveau potentiel :

$$V_{\text{vp}}^{(2)}(r) = -\frac{Z\alpha}{r} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^2 \int_4^\infty \frac{d(q^2)}{q^2} e^{-m_e q r} u^{(2)}(q^2). \quad (3.40)$$

On trouve par exemple :

$$E_{1s} = -24.36484(11) \text{ meV}, \quad (3.41)$$

$$E_{2p_{1/2}} = -0.3460252(26) \text{ meV}, \quad (3.42)$$

$$E_{2p_{1/2} \rightarrow 1s} = 24.01882(11) \text{ meV}. \quad (3.43)$$

### III-2-5 Polarisation du vide double

Cette correction est représentée par le diagramme de la figure 3.7 et correspond à la présence de deux interactions Coulombiennes modifiées par la polarisation du vide au premier ordre à une boucle (interaction  $V_{vp}$ ).

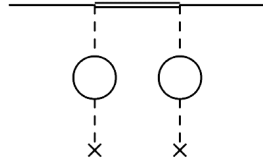


Fig. 3.7 – Diagramme de la polarisation du vide double.

Elle équivaut à l'équation suivante :

$$E = \langle \phi_{n,l} | V_{vp} \frac{1}{(E_{n,l}^0 - H_0)'} V_{vp} | \phi_{n,l} \rangle . \quad (3.44)$$

On obtient cette expression par un développement en perturbation au second ordre de la même manière que celle démontrée dans la section II de l'annexe, où il suffit de remplacer le terme  $(\delta H + V^{BP})$  par  $V_{vp}$ . On trouve par exemple :

$$E_{1s} = -4,110407(25) \text{ meV}, \quad (3.45)$$

$$E_{2p_{1/2}} = -0,008160536(91) \text{ meV}, \quad (3.46)$$

$$E_{2p_{1/2} \rightarrow 1s} = 4,102246(25) \text{ meV}. \quad (3.47)$$

---

## III-3 Effets de taille finie des particules

### III-3-1 Correction principale due à la taille finie des particules

Les particules ont une extension spatiale, l'interaction n'est donc pas ponctuelle. Pour rendre compte de l'effet de cette répartition de charge, on peut faire le calcul suivant, où une particule de masse  $\mu$  et de fonction d'onde  $\phi$  est dans le champ d'une source non ponctuelle. On note provisoirement  $V_C(r)$  le potentiel Coulombien et  $V(r)$  le potentiel réel :

$$\Delta E = \langle \phi | V(r) - V_C(r) | \phi \rangle \simeq |\phi(0)|^2 \int d^3r (V(r) - V_C(r)) . \quad (3.48)$$

Comme la différence  $(V(r) - V_C(r))$  est non nulle seulement autour de  $r = 0$ , on a remplacé la fonction d'onde par sa valeur en 0. On peut introduire le facteur  $\frac{\nabla^2(r^2)}{6} = 1$  (afin de faire apparaître l'équation de Poisson pour le potentiel  $V$ ) :

$$\Delta E \simeq |\phi(0)|^2 \int d^3r \frac{\nabla^2(r^2)}{6} (V(r) - V_C(r)) . \quad (3.49)$$

Après deux intégrations par parties, on obtient un décalage en énergie :

$$\begin{aligned}
 \Delta E &\simeq |\phi(0)|^2 \frac{1}{6} \int d^3r r^2 \nabla^2 (V(r) - V_C(r)) \\
 &\simeq |\phi(0)|^2 \frac{1}{6} Z\alpha \int d^3r r^2 4\pi(\rho(r) - \delta^3(\mathbf{r})) \\
 &\simeq |\phi(0)|^2 \frac{4\pi}{6} Z\alpha \int d^3r r^2 \rho(r) \simeq |\phi(0)|^2 \frac{2\pi}{3} Z\alpha \langle r^2 \rangle \\
 &\simeq \frac{2\mu^3 (Z\alpha)^4}{3n^3} \langle r^2 \rangle \delta_{l0}, \tag{3.50}
 \end{aligned}$$

où on a utilisé  $\nabla^2 V(r) = 4\pi Z\alpha \rho(r)$  où  $\rho$  est la fonction de répartition de la source du potentiel, puis  $\int d^3r r^2 \rho(r) \equiv \langle r^2 \rangle$  où  $\langle r^2 \rangle$  est le rayon moyen de la charge au carré, exprimé en  $\text{eV}^{-2}$  :  $\langle r_{\pi^-}^2 \rangle = (0,8768 \cdot 10^{-15} \text{ m})^2 / (\hbar c)^2$  pour le rayon du proton par exemple.

Plus généralement, pour prendre en compte la taille finie des particules lorsqu'on calcule une correction à l'aide de diagrammes de Feynman, on multiplie l'interaction Coulombienne par le *facteur de forme* des particules. Le facteur de forme a pour expression :

$$G_E(-\mathbf{k}^2) \simeq 1 - \frac{\mathbf{k}^2}{6} \langle r^2 \rangle, \tag{3.51}$$

et l'interaction Coulombienne  $-\frac{Z\alpha}{r}$  écrite dans l'espace des impulsions est :

$$-\frac{4\pi Z\alpha}{\mathbf{k}^2}. \tag{3.52}$$

On obtient donc une correction à la loi de Coulomb de la forme :

$$-\frac{4\pi Z\alpha}{\mathbf{k}^2} \times \left( -\frac{\mathbf{k}^2}{6} \langle r^2 \rangle \right) = \frac{2\pi Z\alpha}{3} \langle r^2 \rangle. \tag{3.53}$$

Ce qui donne (à présent dans l'espace des coordonnées) :

$$E = \langle \phi_{n,l} | \frac{2\pi Z\alpha}{3} \langle r^2 \rangle \delta^3(\mathbf{r}) | \phi_{n,l} \rangle = \frac{2}{3} \pi Z\alpha \langle r^2 \rangle |\phi_{n,l}(0)|^2 = \frac{2\mu^3 (Z\alpha)^4}{3n^3} \langle r^2 \rangle \delta_{l0}. \tag{3.54}$$

On retrouve le résultat de 3.50.

Dans notre cas, nous avons deux particules de tailles finies, au premier ordre la contribution à l'énergie est donc, pour chacune des particules :

$$E_{p,\pi^-} = \frac{2\mu^3 (Z\alpha)^4}{3n^3} \langle r_{p,\pi^-}^2 \rangle \delta_{l0}. \tag{3.55}$$

On trouve par exemple :

$$E_{p \ 2p \rightarrow 1s} = -87,07547(58) \langle r_p^2 \rangle = -66,9(11) \text{ meV}. \tag{3.56}$$

### III-3-1.a Définition du rayon des particules et terme de Darwin

Revenons sur la remarque énoncée au paragraphe III-1 concernant le terme de Darwin. On a évoqué le fait que l'anomalie du moment magnétique était absent de ce terme, contrairement à ce qui serait obtenu si l'on suivait directement les résultats de [BARKER and GLOVER 1955]. Cette différence provient du fait qu'il existe dans la littérature différentes définitions du rayon de la charge. Nous avons utilisé la définition utilisée dans le cadre des mesures expérimentales [FRIAR ET AL. 1997] et qui inclut la contribution à l'énergie due à l'anomalie du moment magnétique. Le rayon  $\langle r^2 \rangle_F$  qui intervient implicitement dans les références en désaccord avec notre Hamiltonien est relié à celui que nous utilisons, et que nous notons temporairement  $\langle r^2 \rangle_G$ , par la relation :

$$G_E(-\mathbf{k}^2) = 1 - \frac{\mathbf{k}^2}{6} \langle r^2 \rangle_G = 1 - \frac{\mathbf{k}^2}{6} \langle r^2 \rangle_F - \frac{\mathbf{k}^2}{4m_p^2} \kappa = F_1(-\mathbf{k}^2) - \frac{-\mathbf{k}^2}{4m_p^2} F_2(\mathbf{k}^2), \quad (3.57)$$

où l'on retrouve  $\kappa$  et où  $F_1$  et  $F_2$  sont respectivement les facteurs de forme de Dirac et Pauli, et qui sont entre autres définis dans [BERESTETSKII ET AL. 1982 ; FRIAR ET AL. 1997 ; EIDES ET AL. 2001].

On obtient donc une correction à la loi de Coulomb de la forme :

$$-\frac{4\pi Z\alpha}{\mathbf{k}^2} \times \left( -\frac{\mathbf{k}^2}{6} \langle r^2 \rangle_F - \frac{\mathbf{k}^2}{4m_p^2} \kappa \right) = \frac{2\pi Z\alpha}{3} \langle r^2 \rangle_F + \frac{\pi(Z\alpha)}{m_p^2} \kappa. \quad (3.58)$$

Ce qui donne (à présent dans l'espace des coordonnées) :

$$E = \langle \phi_{n,l} | \frac{2\pi Z\alpha}{3} \langle r^2 \rangle_F \delta^3(\mathbf{r}) + \frac{\pi(Z\alpha)}{m_p^2} \kappa \delta^3(\mathbf{r}) | \phi_{n,l} \rangle \quad (3.59)$$

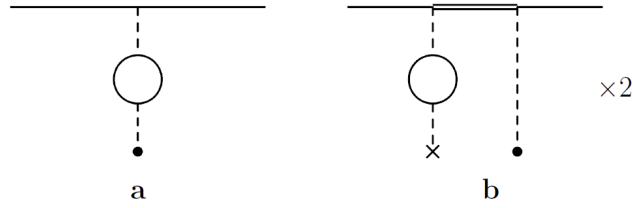
$$= \frac{2}{3} \pi Z\alpha \langle r^2 \rangle_F |\phi_{n,l}(0)|^2 + \frac{\pi(Z\alpha)}{m_p^2} \kappa |\phi_{n,l}(0)|^2 \quad (3.60)$$

$$= \frac{2\mu^3 (Z\alpha)^4}{3n^3} \langle r^2 \rangle_F \delta_{l0} + \frac{1}{2} \frac{\mu^3 (Z\alpha)^4}{m_p^2 n^3} 2\kappa \delta_{l0}. \quad (3.61)$$

Le dernier terme de 3.59 correspond à la contribution à l'énergie correspondant au terme absent de notre Hamiltonien. On comprend donc pourquoi le terme de Darwin peut de manière alternative contenir l'anomalie du moment magnétique et que l'utilisation de  $\langle r^2 \rangle_G$  implique qu'il ne faut pas l'inclure dans notre Hamiltonien de Breit-Pauli.

### III-3-2 Effets de taille finie des particules et polarisation du vide

A l'interaction entre les particules de tailles finies, on doit ajouter la correction due à la polarisation du vide. Les diagrammes correspondant à ce phénomène sont représentés sur la figure 3.8.



**Fig. 3.8** – Diagrammes de correction de polarisation du vide à la correction de taille finie des particules. Le point symbolise une interaction avec un potentiel modifié par l’extension de la charge.

Ils correspondent aux corrections  $E^a$  et  $E^b$ .

$$E^a = -\frac{2}{3}\pi Z\alpha\langle r^2\rangle \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \bar{\omega}(-\mathbf{p}^2) \hat{\rho}(\mathbf{p}), \quad (3.62)$$

où  $\hat{\rho}$  est la transformée de Fourier de la densité de charge. On va intégrer cette expression dans l’espace des coordonnées. En remplaçant  $\bar{\omega}(-\mathbf{p}^2)$  par son expression (3.16) :

$$\begin{aligned} E^a &= -\frac{2}{3}\pi Z\alpha\langle r^2\rangle \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\alpha}{\pi}(-\mathbf{p}^2) \int_4^\infty \frac{d(q^2)}{q^2} \frac{1}{(m_e q)^2 + \mathbf{p}^2} u(q^2) \int d^3r \phi^2(\mathbf{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} \\ &= \frac{2}{3}\alpha Z\alpha\langle r^2\rangle \int_4^\infty \frac{d(q^2)}{q^2} u(q^2) \int d^3r \phi^2(\mathbf{r}) \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left(1 - \frac{(m_e q)^2}{(m_e q)^2 + \mathbf{p}^2}\right) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}. \end{aligned} \quad (3.63)$$

En utilisant la transformation <sup>1</sup>  $\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{\mathbf{p}^2 + a^2} = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ar}}{r}$  :

$$E^a = -\frac{2}{3}\alpha Z\alpha\langle r^2\rangle \frac{1}{4\pi} \int_4^\infty \frac{d(q^2)}{q^2} u(q^2) \left(-R_{n,l}^2(0) + \int_0^\infty dr R_{n,l}^2(r) r (m_e q)^2 e^{-m_e q r}\right). \quad (3.64)$$

On trouve par exemple :

$$E_p^a \text{ 1s} = 0,1581(25) \text{ meV}, \quad (3.65)$$

$$E_p^a \text{ 2p} = -0,0004300(68) \text{ meV}, \quad (3.66)$$

$$E_p^a \text{ 2p} \rightarrow \text{1s} = -0,1585(25) \text{ meV}. \quad (3.67)$$

Le second diagramme correspond à

$$E^b = 2 \left(\frac{2}{3}\pi Z\alpha\right) \langle r^2\rangle \int d^3r \phi_{n,l}(\mathbf{r}) V_{\text{vp}}(r) G'_{n,l}(r,0) \phi_{n,l}(0) \quad (3.68)$$

On trouve par exemple :

$$E_p^b \text{ 2p} \rightarrow \text{1s} = -0,3230(51) \text{ meV}. \quad (3.69)$$

1. démontrée dans [PESKIN and SCHROEDER 1995, § 4.7] par exemple



### III-4 Self-énergie et échange de deux photons

#### III-4-1 Self-énergies

Jusqu'à présent, la valeur utilisée pour la self-énergie du pion n'a jamais été publiée ; elle vient d'un rapport interne [JECKELMANN 1985] utilisant un programme de calcul numérique (programme BIPA). Nous allons la calculer analytiquement, ainsi que la self-énergie du proton.

Dans le calcul de ces self-énergies, la contribution du domaine d'intégration relatif aux hautes énergies est déjà incluse dans la définition du rayon des particules, comme cela est expliqué dans [PACHUCKI 1995b] par exemple dans le cas du proton.

En effet, en QED, le fait de sans cesse émettre et réabsorber des photons confère à la particule un rayon [EIDES ET AL. 2001, § 3.2], même si celle-ci est ponctuelle comme l'électron. C'est de cela que résulte le *facteur de forme* de l'électron utilisé en QED, qui apparaît dans la partie du calcul faisant intervenir les hautes énergies et qui est calculé en renormalisant la théorie. C'est pourquoi dans le cas d'une particule dotée d'une taille finie à l'origine, la mesure du rayon inclut les effets de la self-énergie dans le domaine des hautes énergies.

Pour éviter le double comptage, on va donc ne pas en tenir compte. Les parties restantes sont indépendantes du spin, et l'on peut donc utiliser la formule déjà établie pour les fermions [ITZYKSON and ZUBER 1980].

$$E_{\pi^-} = \frac{4}{3\pi n^3} \alpha(Z\alpha)^4 \frac{\mu^3}{m_{\pi^-}^2} \left[ -k(n, l) + \ln \frac{m_{\pi^-}}{\mu(Z\alpha)^2} \delta_{l,0} \right], \quad (3.70)$$

$$E_p = \frac{4}{3\pi n^3} Z^2 \alpha(Z\alpha)^4 \frac{\mu^3}{m_p^2} \left[ -k(n, l) + \ln \frac{m_p}{\mu(Z\alpha)^2} \delta_{l,0} \right], \quad (3.71)$$

où  $k(n, l)$  est le logarithme de Bethe.

Ces corrections correspondent au diagrammes de la figure 3.9.



Fig. 3.9 – Diagrammes de self-énergies du pion (trait fin) et du proton (trait épais).

On trouve par exemple :

$$E_{\pi^- 1s} = 5,6561223(90) \text{ meV}, \quad (3.72)$$

$$E_{\pi^- 2p} = 0,0030339050(47) \text{ meV}, \quad (3.73)$$

$$E_{\pi^- 2p \rightarrow 1s} = -5,6530884(90) \text{ meV} \quad (3.74)$$

Comme la partie issue du domaine d'intégration relatif aux hautes énergies est déjà incluse par définition dans le rayon de la charge, un calcul complet de la self-énergie du pion aurait seulement un intérêt purement théorique comme cela est mentionné dans [JENTSCHURA ET AL. 2002].

### III-4-2 Echange de deux photons

On peut aller un peu plus loin en évaluant la correction de recul connue sous le nom « correction de Salpeter » [SALPETER 1952] en  $(Z\alpha)^5$ . Cependant, il serait inapproprié de calculer l'ensemble des termes comme dans le cas d'un atome classique. En effet, nous ne disposons pas d'un cadre théorique séparant les interactions fortes et électromagnétiques entre les particules à ce niveau du développement en  $\alpha$ . Il existe un recouvrement des interactions que l'on peut seulement en partie contourner en calculant la partie de cette correction de recul ne concernant que les interactions non locale, qui sont toujours hors du domaine de l'interaction forte. Ces parties sont indépendantes du spin des particules et l'on peut donc utiliser les résultats déjà obtenus pour les fermions. On va utiliser le résultat de [PACHUCKI 1999] qui donne les termes logarithmiques dominants ainsi qu'un terme additionnel de recul  $\left\langle P \left( \frac{1}{(\mu\alpha r)^3} \right) \right\rangle_{nl}$ , où  $P$  est une fonction de distribution permettant de régulariser la singularité à l'origine [PACHUCKI 1999]. On obtient alors :

$$E = \frac{(Z\alpha)^5}{\pi n^3} \frac{\mu^3}{m_p m_{\pi^-}} \left[ -\frac{2}{3} \ln(Z\alpha) \delta_{l,0} - \frac{8}{3} k(n,l) - n^3 \frac{7}{6} \left\langle P \left( \frac{1}{(\mu\alpha r)^3} \right) \right\rangle_{nl} \right]. \quad (3.75)$$

On trouve par exemple :

$$E_{1s} = -0,13015721(53) \text{ meV}, \quad (3.76)$$

$$E_{2p} = -0,003482601(15) \text{ meV}, \quad (3.77)$$

$$E_{2p \rightarrow 1s} = 0,12667461(52) \text{ meV}. \quad (3.78)$$

---

### III-5 Recul de l'atome

L'énergie du photon émis est égale à la différence d'énergie entre les niveaux atomiques initial et final moins l'énergie de recul de l'atome. Or c'est bien l'énergie du photon émis qui compte dans notre expérience. Etant donné que l'hydrogène pionique est relativement léger ( $\approx 1\text{MeV}$ ) et que les photons émis sont relativement énergétiques ( $\approx 3 \text{ keV}$ ), il nous faut tenir compte de l'énergie de recul. Calculons l'énergie de recul qu'il nous faut ôter de la différence d'énergie entre les niveaux. Pour faciliter la démonstration, nous allons momentanément rétablir la présence de la constante de planck  $h$  et de la vitesse de la lumière  $c$ .

Pour simplifier les calculs, admettons qu'avant l'émission l'atome soit au repos. Les énergies des niveaux initial et final sont respectivement  $E_b$  and  $E_a$ . Après l'émission, l'énergie de l'atome est <sup>1</sup>  $E$ , incluant l'énergie cinétique et l'énergie de l'état final  $E_a$ . On recherche l'énergie du photon émis  $h\nu_{eff}$ .

La conservation de l'impulsion donne :

$$0 = p + \frac{h\nu_{eff}}{c}, \quad (3.79)$$

où  $p$  est l'impulsion de l'atome.

La conservation de l'énergie donne :

$$E_b = E + h\nu_{eff}. \quad (3.80)$$

Nous avons d'autre part :

$$E = E_a + \frac{1}{2}Mv^2 = E_a + \frac{1}{2M} \left( \frac{h\nu_{eff}}{c} \right)^2, \quad (3.81)$$

où nous avons utilisé (3.79), qui donne  $p = Mv = \frac{-h\nu_{eff}}{c}$ , où  $v$  est la vitesse et  $M$  la masse de l'atome.

En utilisant (3.80), nous obtenons :

$$E_b - h\nu_{eff} = E_a + \frac{1}{2M} \left( \frac{h\nu_{eff}}{c} \right)^2 \Leftrightarrow h\nu_{eff} = (E_b - E_a) - \frac{1}{2M} \left( \frac{h\nu_{eff}}{c} \right)^2, \quad (3.82)$$

en utilisant l'équation (3.82) dans elle-même, on obtient :

$$h\nu_{eff} \simeq (E_b - E_a) - \frac{1}{2Mc^2} (E_b - E_a)^2. \quad (3.83)$$

Appliquons ce résultat à notre atome, où pour la transition  $2p \rightarrow 1s$   $\Delta E_{2p \rightarrow 1s} = 2429,5020(55)$  eV donné par le tableau 3.3 et  $Mc^2 = 1077,842193(36)10^6$  eV.

$$h\nu_{eff} - \Delta E_{2p \rightarrow 1s} \simeq -2,738110(12) \text{ meV}. \quad (3.84)$$

Notons que cette correction n'est généralement pas prise en compte dans les articles théoriques [SIGG ET AL. 1996 ; LYUBOVITSKIY and RUSETSKY 2000].

1. Etant donné qu'elle n'intervient pas dans le problème, on ne tient pas compte de l'énergie contenue dans la masse.

## IV Résumé des résultats

### IV-1 Résumé des résultats sous forme de tableaux

Dans les tableaux 3.3, 3.4, 3.2 et 3.1  $F$  est le moment cinétique total. Le groupe de chiffre entre parenthèse est l'incertitude. Lorsque celui-ci est affecté d'une étoile, cela signifie que l'incertitude est due en majeure partie au rayon de la particule alors impliquée. Dans le cas où il n'y a pas d'étoile, l'incertitude est due à la masse du pion. On a conservé uniquement six décimales : () signifie que l'incertitude est  $< 1 \mu\text{eV}$ .

CONTRIBUTION		3p	4p
Equation de Schrödinger (3.5)		-359438,3(79)	-202184,05(45)
PV principale (3.25)		-11,406601(86)	-4,920557(37)
Interaction de Breit-Pauli (3.6), (3.7)	$F=1/2$	-4,220937(13)	-1,942614(6)
	$F=3/2$	-1,967051(03)	-0,991756(02)
Effet de taille finie principal(3.54)	$p$	0	0
	$\pi^-$	0	0
PV à 2 boucles (3.39)		-0,107956()	-0,046283()
Self-énergie du pion (3.70)		0,001144()	0,000530()
PV double (3.44)		-0,002472()	-0,001034()
Correction relativiste à la PV (3.33)	$F=1/2$	-0,008588()	-0,003710()
	$F=3/2$	0,002362()	0,001008()
PV et effet de taille finie, correction « b » (3.68)	$p$	0	0
	$\pi^-$	0	0
PV muonique (3.25)		0,000000()	0,000000()
Self-énergie du proton (3.71)		0,000025()	0,000012()
PV et effet de taille finie, correction « a » (3.64)	$p$	-0,000142(03)*	-0,000062()*
	$\pi^-$	-0,000083(02)*	-0,000036()*
Echange de 2 photons (3.75)		-0,000959()	-0,000390()
Total	$F=1/2$	-359454,06(79)	-202190,97(45)
	$F=3/2$	-359451,80(79)	-202190,01(45)
Total sans Schrödinger	$F=1/2$	-15,746569(99)	-6,914145(43)
	$F=3/2$	-13,481734(89)	-5,958569(39)

**Tab. 3.1** – Résumé des valeurs théoriques des contributions en meV aux énergies des niveaux  $3p_{1/2}$ ,  $3p_{3/2}$ ,  $4p_{1/2}$  et  $4p_{3/2}$  de l'hydrogène pionique.

CONTRIBUTION		1s	2p
Equation de Schrödinger (3.5)		-3234944,8(71)	-808736,2(18)
PV principale (3.25)		-3240,802(16)	-35,79480(28)
Interaction de Breit-Pauli (3.6), (3.7)	$F=1/2$	-178,46117(32)	-11,655153(37)
	$F=3/2$		-4,048290(04)
Effet de taille finie principal(3.54)	$p$	$66,9(11)^* = 87,07547(58)\langle r_p^2 \rangle$	0
	$\pi^-$	$39,32(94)^* = 87,07547(58)\langle r_{\pi^-}^2 \rangle$	0
PV à 2 boucles (3.39)		-24,36484(11)	-0,346025(03)
Self-énergie du pion (3.70)		5,656122(09)	0,003034()
PV double (3.44)		-4,110407(25)	-0,008161()
Correction relativiste à la PV (3.33)	$F=1/2$	-0,432480(02)	-0,026426()
	$F=3/2$		0,007631()
PV et effet de taille finie, correction « b » (3.68)	$p$	0,3230(51)*	0
	$\pi^-$	0,1898(46)*	0
PV muonique (3.25)		-0,279306(02)	0,000000()
Self-énergie du proton (3.71)		0,159247(02)	0,000067()
PV et effet de taille finie, correction « a » (3.64)	$p$	0,1581(25)*	-0,000430(07)*
	$\pi^-$	0,0929(23)*	-0,000253(07)*
Echange de 2 photons (3.75)		-0,130157()	-0,003483()
Total	$F=1/2$	-3238280,6(73)	-808784,0(18)
	$F=3/2$		-808776,4(18)
Contribution à l'erreur due à $m_{\pi^-}$ pour l'état 1s		7,08	
Total sans Schrödinger	$F=1/2$	-3335,7(15)	-47,83163(32)
	$F=3/2$		-40,19071(29)
Contribution à l'erreur due à $m_{\pi^-}$ pour l'état 1s		0,015	
Contribution à l'erreur due à $\langle r_p^2 \rangle$ ; $\langle r_{\pi^-}^2 \rangle$ pour l'état 1s		1,06; 0,94	

Tab. 3.2 – Résumé des valeurs théoriques des contributions en meV aux énergies des niveaux  $1s_{1/2}$ ,  $2p_{1/2}$ , et  $2p_{3/2}$  de l'hydrogène pionique.

CONTRIBUTION		2p → 1s	3p → 1s	4p → 1s
Equation de Schrödinger (3.5)		2426208,6(53)	2875506,5(63)	3032760,8(67)
PV principale (3.25)		3205,007(15)	3229,395(15)	3235,881(15)
Interaction de Breit-Pauli (3.6), (3.7)	F=1/2	166,80602(28)	174,24024(31)	176,51856(31)
	F=3/2	174,41288(31)	176,49412(32)	177,46942(32)
Effet de taille finie principal(3.54)	p	−66,9(11)* = −87,07547(58)⟨r <sub>p</sub> <sup>2</sup> ⟩		
	π <sup>−</sup>	−39,32(94)* = −87,07547(58)⟨r <sub>π<sup>−</sup></sub> <sup>2</sup> ⟩		
PV à 2 boucles (3.39)		24,01882(11)	24,25689(11)	24,31856(11)
Self-énergie du pion (3.70)		−5,653088(09)	−5,654979(09)	−5,655592(09)
PV double (3.44)		4,102246(25)	4,107934(25)	4,109372(25)
Correction relativiste à la PV (3.33)	F=1/2	0,406054(02)	0,423892(02)	0,428770(02)
	F=3/2	0,440111(03)	0,434842(02)	0,433488(02)
PV et effet de taille finie, correction « b » (3.68)	p	−0,3230(51)*		
	π <sup>−</sup>	−0,1898(46)*		
PV muonique (3.25)		0,279306(02)	0,279306(02)	0,279306(02)
Self-énergie du proton (3.71)		−0,159180(02)	−0,159222(02)	−0,159235(02)
PV et effet de taille finie, correction « a » (3.64)	p	−0,1585(25)*	−0,1582(25)*	−0,1581(25)*
	π <sup>−</sup>	−0,0931(23)*	−0,0929(23)*	−0,0929(23)*
Echange de 2 photons (3.75)		0,126675()	0,129198()	0,129767()
Total	F=1/2	2429494,0(55)	2878822,8(65)	3036085,9(68)
	F=3/2	2429504,2(55)	2878828,8(65)	3036090,6(68)
Contribution à l'erreur due à m <sub>π<sup>−</sup></sub>		5,32	6,30	6,64
Total sans Schrödinger	F=1/2	3288,1(15)	3320,2(15)	3329,0(15)
	F=3/2	3295,5(15)	3322,3(15)	3329,8(15)
Contribution à l'erreur due à m <sub>π<sup>−</sup></sub>		0,015	0,015	0,015
Contribution à l'erreur due à < r <sub>p</sub> <sup>2</sup> >; < r <sub>π<sup>−</sup></sub> <sup>2</sup> >		1,06; 0,94		

**Tab. 3.3** – Résumé des valeurs théoriques des contributions en meV aux énergies des transitions 2p<sub>1/2</sub>, 2p<sub>3/2</sub>, 3p<sub>1/2</sub>, 3p<sub>3/2</sub>, 4p<sub>1/2</sub>, 4p<sub>3/2</sub> → 1s<sub>1/2</sub> de l'hydrogène pionique. Dans ce tableau, les totaux ne tiennent pas compte de la correction de recul de l'atome (voir pour cela le tableau 3.4).

CONTRIBUTION		2p → 1s	3p → 1s	4p → 1s
Recul de l'atome	F=1/2	-2,738109(12)	-3,844553(16)	-4,276062(18)
	F=3/2	-2,738106(12)	-3,844559(16)	-4,276065(18)
Total du tableau 3.3 + recul de l'atome	F=1/2	2429494,0(55)	2878822,8(65)	3036085,9(68)
	F=3/2	2429501,4(55)	2878824,9(65)	3036086,3(68)
Contribution à l'erreur due à $m_{\pi^-}$		5,32	6,30	6,64
Total sans Schrödinger du tableau 3.3 + recul de l'atome	F=1/2	3285,3(15)	3316,3(15)	3324,7(15)
	F=3/2	3292,8(15)	3318,4(15)	3325,5(15)
Contribution à l'erreur due à $m_{\pi^-}$		0,015	0,015	0,015
Contribution à l'erreur due à $\langle r_p^2 \rangle$ ; $\langle r_{\pi^-}^2 \rangle$		1,06; 0,94		

**Tab. 3.4** – Résumé des valeurs théoriques des contributions en meV aux énergies des transitions  $2p_{1/2}, 2p_{3/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}, 4p_{1/2}, 4p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  de l'hydrogène pionique. Dans ce tableau la correction de recul de l'atome est affectée au total du tableau 3.3.

On peut rassembler les valeurs des états de structures fines pour lesquels  $F = 1/2$  et  $F = 3/2$ , en considérant la répartition statistique des états [TRASSINELLI and INDELICATO 2007], selon laquelle les poids à affecter sont  $(2F + 1)$ . On obtient les valeurs pour les transitions rassemblées dans le tableau 3.5.

2p → 1s	3p → 1s	4p → 1s
2429,4991(55)	2878,8243(65)	3036,0861(68)

**Tab. 3.5** – Moyenne en eV des transitions sur la répartition statistique des états de structure fine.

#### IV-1-1 Incertitudes sur les énergies des niveaux

##### IV-1-1.a L'erreur pour chaque correction

Pour les termes ne comportant pas  $\langle r_{\pi^-,p}^2 \rangle$ , seule l'incertitude de la masse du pion est significative. On calcule l'énergie  $E(n,l)$  avec la valeur de la masse du pion  $m_{\pi^-}$ , puis on recalculé l'énergie  $\tilde{E}(n,l)$  avec la masse modifiée  $m_{\pi^-} + \delta m_{\pi^-}$ . L'erreur est  $|E(n,l) - \tilde{E}(n,l)|$ .

Pour les termes comportant  $\langle r_{\pi^-,p}^2 \rangle$ , pour l'incertitude due à la masse on opère la même procédure que précédemment. L'erreur due au rayon est  $\frac{2\delta r_{\pi^-,p}}{r_{\pi^-,p}} E(n,l)$ . On assemble les erreurs dues à la masse et aux rayons en calculant la somme quadratique<sup>1</sup>.

1. C'est-à-dire la racine carrée de la somme des carrés des incertitudes dues aux différents paramètres.

IV-1-1.b *L'erreur sur la valeur totale (somme des contributions)*

L'incertitude sur la valeur totale des énergies absolues est la somme quadratique des incertitudes dues aux différents paramètres ( $m_{\pi^-}$ ,  $\langle r_{\pi^-}^2 \rangle$ ,  $\langle r_p^2 \rangle$ ).

L'incertitude due à la masse du pion est  $|E_{\text{tot}}(n, l) - \tilde{E}_{\text{tot}}(n, l)|$ , c'est-à-dire, la quantité dont change l'énergie totale  $E_{\text{tot}}(n, l)$  quand  $m_{\pi^-}$  est remplacée par  $m_{\pi^-} + \delta m_{\pi^-}$ . En d'autres termes, l'erreur est la différence entre la somme des corrections calculés avec  $m_{\pi^-}$  et la somme des corrections calculées avec  $m_{\pi^-} + \delta m_{\pi^-}$ .

L'incertitude due à  $\langle r_{\pi^-, p}^2 \rangle$  est  $|\frac{2\delta r_{\pi^-, p}}{r_{\pi^-, p}} E_{\text{sous-tot}}(1s)|$ , où  $E_{\text{sous-tot}}$  est la somme des contributions faisant intervenir le rayon de la particule.

IV-1-2 **Incertitude sur les énergies de transitions**

IV-1-2.a *L'erreur pour chaque correction*

A nouveau, pour les termes ne comportant pas  $\langle r_{\pi^-, p}^2 \rangle$ , seule l'incertitude de la masse du pion est significative. On calcule  $E(n, l)$  et  $E(n', l')$  avec la valeur de la masse du pion  $m_{\pi^-}$ , puis  $\tilde{E}(n, l)$  et  $\tilde{E}(n', l')$  avec la masse modifiée  $m_{\pi^-} + \delta m_{\pi^-}$ . L'erreur sur la correction est  $|(E(n', l') - E(n, l)) - (\tilde{E}(n', l') - \tilde{E}(n, l))|$ ,

Pour les termes comportant  $\langle r_{\pi^-, p}^2 \rangle$ , pour l'incertitude due à la masse on opère la même procédure que précédemment. L'erreur due au rayon est  $\frac{2\delta r}{r}(E(n', l') - E(n, l))$ . On assemble les erreurs dues à la masse et aux rayons en calculant la somme quadratique.

IV-1-2.b *L'erreur sur la valeur totale (somme des contributions)*

L'incertitude sur la valeur totale des transitions est la somme quadratique des incertitudes dues aux différents paramètres ( $m_{\pi^-}$ ,  $\langle r_{\pi^-}^2 \rangle$ ,  $\langle r_p^2 \rangle$ ).

L'incertitude due à la masse du pion  $m_{\pi^-}$  est  $|(E_{\text{tot}}(n', l') - E_{\text{tot}}(n, l)) - (\tilde{E}_{\text{tot}}(n', l') - \tilde{E}_{\text{tot}}(n, l))|$ , c'est-à-dire, la quantité dont change l'énergie totale de la transition quand  $m_{\pi^-}$  est remplacée par  $m_{\pi^-} + \delta m_{\pi^-}$ .

L'erreur due à  $\langle r_{\pi^-, p}^2 \rangle$  est  $|\frac{2\delta r_{\pi^-, p}}{r_{\pi^-, p}} (E_{\text{sous-tot}}(n', l') - E_{\text{sous-tot}}(n, l))|$ , où  $E_{\text{sous-tot}}$  est la somme des contributions faisant intervenir le rayon de la particule.

---

**IV-2 Comparaison des résultats aux précédentes valeurs utilisées**

Les valeurs faisant office de références pour la contribution de l'interaction électromagnétique aux niveaux de l'hydrogène pionique sont issues de [SIGG ET AL. 1996] et [LYUBOVITSKIY and RUSETSKY 2000]. Dans [SIGG ET AL. 1996], et pour l'état 1s, le terme dominant est donné par l'équation de Klein-Gordon. La correction principale due à la taille finie des particules est aussi prise en compte. La polarisation du vide principale (potentiel de Uehling) et les corrections correspondantes dues à la taille finie des



particules calculées en utilisant le potentiel de [FULLERTON and RINKER 1976] sont incluses. Les termes de recul du noyau, les termes relatifs au spin et à l'anomalie du moment magnétique du proton sont calculés en utilisant le potentiel de Coulomb amélioré donné par [AUSTEN and DE SWART 1983]. Les corrections de polarisation du vide à l'ordre suivant et de self-énergie sont ajoutées et issues de [JECKELMANN 1985], c'est-à-dire obtenues par le programme de calcul BIPA. Pour les niveaux 3p et 4p, seuls les contributions de l'équation de Klein-Gordon et de la polarisation du vide principale sont calculées. Malheureusement, essentiellement aucun calcul n'est explicité.

Dans [LYUBOVITSKIJ and RUSETSKY 2000], on part d'un Lagrangien QED+QCD<sup>1</sup>. Les termes du Hamiltonien qui en découlent sont regroupés en fonction du type d'interaction (électromagnétique ou forte) à laquelle ils sont reliés. Ils aboutissent exactement à l'expression pour l'énergie que nous obtenons pour le Hamiltonien de Breit-Pauli (équations 3.10 et 3.11) incluant l'anomalie du moment magnétique du proton, avec aussi les énergies des corrections principales de tailles finies des particules. Contrairement à notre Hamiltonien, dans cette référence l'anomalie du moment magnétique est présente dans le terme de Darwin. La contribution de la polarisation du vide principale est par ailleurs ajoutée. Seules les contributions à l'énergie du niveau 1s sont données.

Focalisons-nous pour commencer non pas sur les transitions, mais sur les niveaux d'énergie. Etant donné que nous obtenons la même expression pour la contribution principale à l'énergie (équations 3.10 et 3.11) que celle obtenue dans [LYUBOVITSKIJ and RUSETSKY 2000], on en conclut qu'il n'y a aucun désaccord si l'on met de côté le terme supplémentaire impliquant l'anomalie du moment magnétique du proton présent dans le Hamiltonien de [LYUBOVITSKIJ and RUSETSKY 2000]. Ceci a été vérifié : il a fallu refaire nos calculs en utilisant les mêmes valeurs pour les constantes. En ce qui concerne le résultat de [SIGG ET AL. 1996], si l'on associe leur valeur pour l'énergie correspondant à l'équation de Klein-Gordon à celle du terme de recul relativiste qui tient compte du spin et du moment anormal du proton, on ne trouve pas de désaccord (toujours en tenant compte dans les calculs du fait que nous n'avons pas d'anomalie du moment magnétique dans le terme de Darwin) avec notre valeur pour le terme équivalent : le terme de l'interaction de Breit-Pauli. En résumé, le désaccord observé entre notre valeur et celles des deux références tient à l'absence d'anomalie du moment magnétique dans le terme de Darwin dans notre cas.

En revanche, dans le cas de la polarisation du vide au premier ordre pour l'état 1s, notre résultat 3240,802(16) meV est bien en accord avec celui de [LYUBOVITSKIJ and RUSETSKY 2000] : 3241 meV, mais en désaccord avec celui de [SIGG ET AL. 1996] : 3246(1) meV.

D'autre part, pour la polarisation du vide à l'ordre suivant, on est encore en désaccord avec la valeur issue de [SIGG ET AL. 1996] donnée par [JECKELMANN 1985] : -18 meV contre -24,36484(11) meV pour notre valeur.

Enfin, on peut comparer les self-énergies. La contribution de self-énergie du pion donnée par [SIGG ET AL. 1996] est de  $7 \pm 3$  meV, alors que notre résultat est de 5,656122(09) meV. La différence est de l'ordre de 10% de la précision de l'expérience [GOTTA ET AL. 2008].

1. QCD est l'acronyme de Quantum ChromoDynamics : chromodynamique quantique. C'est le modèle théorique décrivant l'interaction forte.

Intéressons-nous à présent aux transitions. Une différence importante entre nos résultats et ceux sus-cités, réside dans le fait que nous avons pris en compte le recul de l'atome lors de l'émission d'un photon. Ceci a pour effet de diminuer la valeur des énergies des transitions de 2,7 meV pour la transition  $2p \rightarrow 1s$  à 4,3 meV pour la transition  $4p \rightarrow 1s$  environ.

Afin de faire une comparaison plus pertinente, nous allons comparer les valeurs des références avec nos résultats ne tenant pas compte de cette correction (la correction est ôtée du résultat que nous comparons). Prenons l'exemple de la transition  $3p \rightarrow 1s$ . On trouve 2878828,2(65) meV à comparer avec la valeur 2878808(08) meV [SIGG ET AL. 1996].

La valeur de [SIGG ET AL. 1996] a été obtenue avec une valeur pour la masse du pion de  $m_{\pi^-} = 139,56995 \pm 0,00035 \text{ MeV}/c^2$ , alors que nous avons utilisé une valeur plus récente :  $m_{\pi^-} = 139,57018 \pm 0,00035 \text{ MeV}/c^2$ . On peut se demander quelle est la part due à la différence de masse dans la différence des résultats. La masse du pion change significativement la valeur totale d'une transition seulement au niveau de la contribution la plus importante : dans notre cas l'équation de Schrödinger<sup>1</sup>, dans leur cas, l'équation de Klein-Gordon. La différence d'énergie pour la transition  $E_{3p \rightarrow 1s}$  imputable à la différence de masse est d'environ 4 meV sur les 25 meV qui séparent les valeurs. On constate donc que la différence des résultats n'est pas uniquement due à la différence des masses utilisées.

En résumé, la différence entre notre résultat et celui de [SIGG ET AL. 1996] pour la transition  $3p \rightarrow 1s$  passe de 25 meV soit 9 ppm à 21 meV soit 7 ppm lorsque la même valeur pour la masse est utilisée. La différence entre notre résultat et celui de [SIGG ET AL. 1996] pour la transition  $4p \rightarrow 1s$  passe de 28 meV soit 9 ppm à 23 meV soit 7 ppm lorsque la même valeur pour la masse est utilisée. La différence entre notre résultat et celui de [LYUBOVITSKIJ and RUSETSKY 2000] pour le niveau 1s passe de 31 meV soit 9 ppm à 26 meV soit 8 ppm lorsque la même valeur pour la masse est utilisée.

Les différences entre nos résultats et les précédents sont de l'ordre de la précision expérimentale ( $\approx 12 \text{ meV}$ ).

Si l'on tient compte à présent de la correction due au recul de l'atome, nos résultats et celui de [SIGG ET AL. 1996] diffèrent de 22 meV soit 7 ppm pour la transition  $3p \rightarrow 1s$ , et de 23 meV soit 8 ppm pour la transition  $4p \rightarrow 1s$ .

En conclusion, notre résultat est le premier à expliciter les calculs de polarisation du vide, les corrections à la polarisation du vide dues à la taille finie des particules, et les self-énergies. Il utilise l'approche qui consiste à considérer sur un même plan les deux particules avec une dépendance en masse exacte grâce à l'utilisation du Hamiltonien de Breit-Pauli, et tient donc compte d'emblée des effets de recul. Il est aussi le premier à avoir pris en compte le recul de l'atome.

---

1. On a aussi tenu compte de la variation du terme de polarisation du vide principal qui est malgré tout très petite.

### IV-3 Conséquence sur la valeur du décalage en énergie dû à l'interaction forte

Au niveau des expériences de spectroscopie de l'hydrogène pionique, deux valeurs pour le décalage en énergie dû à l'interaction forte  $\epsilon_{1s}$  font références actuellement. Elles sont mesurées à partir de la transitions  $3p \rightarrow 1s$  :

$$\epsilon_{1s} = E_{3p \rightarrow 1s}^{el.mag.} - E_{3p \rightarrow 1s}^{mesur} \quad (3.85)$$

La première vaut  $7,108 \pm 0,036$  eV et correspond aux mesures expérimentales de [SCHRÖDER ET AL. 2001]. La seconde vaut  $7,120 \pm 0,012$  eV et correspond à nos mesures : [GOTTA ET AL. 2008]. Dans les deux cas, c'est la valeur de [SIGG ET AL. 1996] pour  $E_{3p \rightarrow 1s}^{el.mag.}$  qui a été utilisée.

Prenons l'exemple de la valeur donnée par [GOTTA ET AL. 2008]. En remplaçant  $E_{3p \rightarrow 1s}^{el.mag.}$  par notre résultat, la valeur de  $\epsilon_{1s}$  devient  $7,098 \pm 0,012$  eV.

Ces résultats diffèrent de 0,3% environ. Pour relier cette quantité à la longueur de diffusion  $a_{\pi^- p \rightarrow \pi^- p}$  on utilise [SIGG ET AL. 1996 ; LYUBOVITSKIJ and RUSETSKY 2000 ; SCHRÖDER ET AL. 2001 ; ERICSON ET AL. 2004 ; GASSER ET AL. 2008] la formule 3.2 :

$$\frac{\epsilon_{1s}}{E_{1s}} = -4 \frac{a_{\pi^- p \rightarrow \pi^- p}}{r_B} (1 + \delta_\epsilon). \quad (3.86)$$

On trouve que la valeur de  $a_{\pi^- p \rightarrow \pi^- p}$  qui change en fonction du rapport  $\frac{\epsilon_{1s}}{E_{1s}}$ , est modifiée d'environ 0,3% et ce quelque soit la théorie utilisée, ce qui correspond environ à la précision expérimentale ( $\approx 0,17\%$ ).

---

### IV-4 Perspectives

Il existe des expériences portant sur d'autres systèmes exotiques sensibles à l'interaction forte similaires à celle effectuée pour l'hydrogène pionique [GOTTA 2004]. La précision des mesures pour le deutérium pionique par exemple indique qu'il serait intéressant et sans difficulté majeure d'appliquer nos calculs aux cas de ce système afin de comparer les résultats correspondant aux longueurs de diffusion. Ceci pourrait permettre, par recoupement, de tester la validité des modèles théoriques prédisant le comportement de ces systèmes.





## CONCLUSION



*Conclusion et perspectives*

Nous avons introduit une nouvelle méthode d'analyse de spectres, utilisant uniquement la simulation pour établir le lien entre raie spectrale et énergie. Cette méthode très robuste nous a permis de trouver 14 énergies pour diverses transitions d'ions à 2, 3 ou 4 électrons avec des précisions allant de 1 ou 2 ppm pour les raies les plus intenses, à 9 ppm pour les moins intenses. Il s'agit des transitions lithiomoïdes  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  et  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s\ ^2S_{1/2}$  de l'argon, du soufre et du chlore, la transition bérylliumoïde  $1s\ 2s^2\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ 2s^2\ ^1S_0$  de l'argon, trois transitions héliumoïdes  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ,  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  et  $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  de l'argon, deux transitions héliumoïdes  $1s\ 2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  et  $1s\ 2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  du soufre ainsi que deux autres transitions encore non identifiées du soufre. Certaines de ces transitions n'avaient jamais été mesurées. Ces valeurs expérimentales, parmi les plus précises au monde, constituent des critères d'évaluation de la précision des prédictions théoriques, notamment dans le cas des ions à plus de deux électrons, où la prise en compte de certains effets dus à la multiplicité des électrons restent à perfectionner. D'autre part, de nombreuses autres transitions présentes sur les spectres acquis pendant l'expérience sont sur le point d'être analysées. Les progrès accomplis au travers de l'identification de nouveaux points clefs comme l'influence de l'inhomogénéité de la source de rayons X, les facteurs d'incertitudes, ou les améliorations récemment apporté à la procédure d'ajustement des courbes qui permettront d'évaluer les largeurs naturelles des raies, peuvent d'autre part être mis à profit dans le cadre de l'étude des atomes exotiques qui utilise le même spectromètre.

Le spectromètre à deux cristaux plans destiné à réaliser des mesures absolues d'énergies de transition dans les ions très chargés a été mis en fonctionnement sur la source ECR SIMPA. Les analyses préliminaires donnent des valeurs pour l'énergie de la transition M1  $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^3S_0$  de l'argon variant de d'environ  $\pm 28$  ppm autour de la valeur théorique [ARTEMYEV ET AL. 2005], et ce, en fonction de la position du spectromètre par rapport à la source. D'autre part, les analyses préliminaires d'autres transitions indiquent que ces variations ne proviennent pas d'un mauvais alignement du spectromètre. Il est trop tôt pour interpréter ce résultat, car le programme de simulation nécessaire à l'analyse des spectres est en cours de développement. Il sera utile de comparer les écarts en énergie des différentes transitions obtenus avec le spectromètre à cristal courbe et ceux obtenus à l'aide du spectromètre à deux cristaux plans.

Enfin, l'étude de la contribution électromagnétique aux niveaux de l'hydrogène pionique nous a permis d'obtenir des valeurs correspondant aux transitions observées à l'Institut Paul Scherrer, qui diffèrent de 7 à 13 ppm des valeurs jusqu'ici utilisées, ce qui change au minimum d'environ 0,3% les valeurs du décalage en énergie dû à l'interaction forte et de la longueur de diffusion  $a_{\pi^-p \rightarrow \pi^-p}$ . Les incertitudes de nos valeurs restent du même ordre que celles des valeurs précédentes étant donné qu'elles sont principalement dues aux grandeurs physiques (masse du pion, rayons des charges). On a à présent, rassemblé dans une étude cohérente et transparente, l'ensemble des corrections relativistes, de recul, radiatives. L'atout de la méthode que nous avons utilisée est de considérer pion et proton sur un même plan du fait de leurs masses de valeurs comparables, c'est-à-dire en ne faisant pas l'approximation selon laquelle le pion orbiterait autour du proton. Les effets de recul, ainsi que les termes relativistes les plus impor-



tants sont inclus d'emblée grâce à l'utilisation du Hamiltonien de Breit-Pauli. Nous avons aussi tenu compte du recul de l'atome qui diminue l'énergie du photon émis par rapport à la différence des niveaux de l'atome, ce qui n'avait pas été fait jusqu'à présent. Les valeurs obtenues donneront lieu à de nouvelles valeurs pour les longueurs de diffusion des hadrons, paramètres déterminant de la théorie de l'interaction forte. Enfin, comme il existe des expériences sur le deutérium pionique et le pionium semblables à celle effectuée pour l'hydrogène pionique, il serait intéressant et sans difficulté majeure d'appliquer nos calculs aux cas de ces systèmes afin de comparer les résultats correspondant aux longueurs de diffusion. Ceci pourrait permettre, par recoupement, de tester la validité des modèles théoriques prédisant le comportement de ces systèmes.

## APPENDICE



## Annexe A

---

---

# Complément de calculs au chapitre 3

---

## I Complément au § III-2-1

---

Le propagateur du photon vérifie l'égalité :

$$\square D(x-y) = 4\pi\delta^4(x-y) \quad (\text{A.1})$$

$\square = \partial^2/\partial t^2 - \nabla^2$  est l'opérateur d'Alembertien.

Soit la transformée de fourier  $\hat{D}_F(k^2)$  définie par :

$$D(x-y) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{-ik(x-y)} \hat{D}_F(k^2) \quad (\text{A.2})$$

En appliquant  $\square$  à A.2, et en utilisant :

$$\delta^4(x-y) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{-ik(x-y)}, \quad (\text{A.3})$$

puis par identification, on obtient :

$$\hat{D}(k^2) = -\frac{4\pi}{k^2} \quad k^2 \neq 0. \quad (\text{A.4})$$

D'autre part le potentiel  $A^\mu(x)$  est relié au courant de charge  $j^\mu(x)$  (dans la jauge où l'on a choisit de travailler) par :

$$\square A^\mu(x) = 4\pi j^\mu(x) \quad (\text{A.5})$$

Pour vérifier cette égalité  $A^\mu(x)$  doit être :

$$A^\mu(x) = \int d^4y D(x-y) j^\mu(y), \quad (\text{A.6})$$

ou plus généralement (convient à d'autres jauges) :

$$\begin{aligned}
 A^\mu(x) &= \int d^4y D^{\mu\nu}(x-y) j_\nu(y) \\
 &= \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{-ik \cdot x} \hat{D}_{\mu\nu}(k) \tilde{j}^\nu(k),
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

où  $\tilde{j}(k)$  est le courant dans l'espace des impulsions. Dans le cas d'un potentiel modifié par la polarisation du vide, on a :

$$A'_\mu(x) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{-ik \cdot x} \hat{D}'_{\mu\nu}(k) \tilde{j}^\nu(k). \tag{A.8}$$

Ce qui donne finalement en introduisant l'opérateur de polarisation renormalisé (voir [ITZYKSON and ZUBER 1980, §7.1.1], [GREINER 2003, §5.2], [BERESTETSKII ET AL. 1982, §103])  $\bar{\omega}(k^2)$  :

$$\hat{D}_{\mu\nu}^{\text{vp}}(k) = \hat{D}_{\mu\nu}(k) (1 - \bar{\omega}^R(k^2)) = -\frac{4\pi g_{\mu\nu}}{k^2} (1 - \bar{\omega}(k^2)). \tag{A.9}$$

On a donc :

$$A'_\mu(x) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{-ik \cdot x} \hat{D}_{\mu\nu}(k) (1 - \bar{\omega}(k^2)) \tilde{j}^\nu(k). \tag{A.10}$$

Si le courant ne dépend pas du temps, c'est-à-dire si  $j^\nu(x) = j^\nu(\mathbf{x})$ ,

$$\tilde{j}^\nu(k) = \int d^4y e^{ik \cdot y} j^\nu(y) = \int dy_0 e^{ik_0 y_0} \int d^3y e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{y}} j^\nu(\mathbf{y}) = 2\pi \delta(k_0) \tilde{j}^\nu(\mathbf{k}), \tag{A.11}$$

il n'y a plus de dépendance en  $k_0$  :

$$A'_\mu(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{D}_{\mu\nu}(0, \mathbf{k}) (1 - \bar{\omega}(-\mathbf{k}^2)) \tilde{j}^\nu(\mathbf{k}). \tag{A.12}$$

En particulier, avec le potentiel Coulombien  $\tilde{j}^\nu(\mathbf{k}) = \int d^3y e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} (-Ze\delta_{\nu 0}\delta^3(\mathbf{x})) = -Ze\delta_{\nu 0}$ ,

$$A'_\mu(\mathbf{x}) = -Ze \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{D}_{\mu 0}(0, \mathbf{k}) (1 - \bar{\omega}(-\mathbf{k}^2)), \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned}
 A'_0(\mathbf{x}) &= -Ze \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2} (1 - \bar{\omega}(-\mathbf{k}^2)) \\
 &= -Ze \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2} + Ze \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2} \bar{\omega}(-\mathbf{k}^2),
 \end{aligned} \tag{A.14}$$

où  $r = |\mathbf{x}|$ . Pour le premier terme, on utilise la formule :

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{\mathbf{p}^2} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} = \frac{1}{r}, \tag{A.15}$$

et pour le deuxième terme, on remplace  $\bar{\omega}(-\mathbf{k}^2)$  par son expression :  $\bar{\omega}(-\mathbf{k}^2) = \frac{\alpha}{\pi}(-\mathbf{k}^2) \int_4^\infty d(q^2) \frac{1}{q^2(m_e^2 q^2 + \mathbf{k}^2)} u(q^2)$  et on utilise la formule :

$$\int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}}{\mathbf{p}^2 + a^2} = \frac{e^{-ar}}{r}. \quad (\text{A.16})$$

On obtient :

$$eA'_0(\mathbf{x}) = -\frac{Z\alpha}{r} - \frac{Z\alpha}{r} \frac{\alpha}{\pi} \int_4^\infty \frac{d(q^2)}{q^2} e^{-m_e q \cdot r} u(q^2) = V_C(r) + V_{\text{vp}}(r), \quad (\text{A.17})$$

$V_C(r)$  désignant le potentiel Coulombien et  $V_{\text{vp}}(r)$  le potentiel modifié par la polarisation du vide 3.20.

## II Complément au § III-2-3

Si  $H = H_0 + W$ , avec  $W$  est un opérateur de perturbation par rapport à  $H_0$ , le développement en perturbation en  $W$  au second ordre donne ([ADKINS and CAMMERATA 1992 ; COHEN-TANNOUJJI ET AL. 1977]) :

$$\begin{aligned} E &= E^0 + \langle n, l | W | n, l \rangle + \sum_{(p,q), (p,q) \neq (n,l)} \frac{\langle n, l | W | p, q \rangle \langle p, q | W | n, l \rangle}{E^0 - H_0} + O(W^3) \\ &= E^0 + \langle n, l | W | n, l \rangle + \langle n, l | W G'_{n,l} W | n, l \rangle + O(W^3). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

La fonction de Green Coulombienne réduite  $G'_{n,l} = \sum_{(p,q), (p,q) \neq (n,l)} \frac{|p,q\rangle \langle p,q|}{E_{n,l}^0 - H_0}$  apparaît.

Dans notre cas où  $W = (\delta H + V^{\text{BP}}) + V_{\text{vp}} + V_{\text{vp}}^{\text{BP}}$ , on ne garde dans le premier terme du développement que le terme  $V_{\text{vp}}^{\text{BP}}$  seul à ne pas déjà avoir été calculé. On ne garde dans le second terme du développement que les termes en  $(\delta H + V^{\text{BP}})$  multipliés par  $V_{\text{vp}}$ , car le terme  $V_{\text{vp}}^2$  ne concerne pas cette correction et est calculé dans la section III-2-5, les autres termes quadratiques sont négligeables ainsi que les termes contenant  $V_{\text{vp}}^{\text{BP}}$ .

$$\begin{aligned} \Delta E &= \langle n, l | V_{\text{vp}}^{\text{BP}} | n, l \rangle + 2 \langle n, l | (\delta H + V^{\text{BP}}) G'_{n,l} V_{\text{vp}} | n, l \rangle \\ &= \int d^3 r \langle n, l | V_{\text{vp}}^{\text{BP}} | r \rangle \langle r | n, l \rangle \\ &\quad + 2 \int d^3 r \int d^3 r' \langle n, l | (\delta H + V^{\text{BP}}) | r \rangle \langle r | G'_{n,l} | r' \rangle \langle r' | V_{\text{vp}} | n, l \rangle \\ &= \int d^3 r \phi_{n,l}(r) V_{\text{vp}}^{\text{BP}}(r) \phi_{n,l}(r) \\ &\quad + 2 \int d^3 r \int d^3 r' \phi_{n,l}(r) (\delta H(r) + V^{\text{BP}}(r)) G'_{n,l}(r, r') V_{\text{vp}}(r') \phi_{n,l}(r') \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$



---

---

# Bibliographie

- G. S. ADKINS, J. D. CAMMERATA. *Reduced Schrödinger-Coulomb Green's function for excited states*. Phys. Rev. A, **45**(3):1314–1319, 1992. [145](#)
- S. K. ALLISON. *The reflecting and resolving power of calcite for X-rays*. Phys. Rev., **41**(1):1, 1932. [78](#)
- C. AMSLER ET AL. (PARTICLE DATA GROUP). *Review of particle physics*. Phys. Lett. B, **667**(1–5):1, 2008. [111](#)
- A. N. ARTEMYEV, V. M. SHABAEV, V. A. YEROKHIN, G. PLUNIEN, G. SOFF. *QED calculation of the  $n = 1$  and  $n = 2$  energy levels in he-like ions*. Phys. Rev. A, **71**(6):062104, 2005. [36](#), [57](#), [61](#), [62](#), [63](#), [66](#), [67](#), [69](#), [70](#), [72](#), [100](#), [139](#)
- N. W. ASHCROFT, N. D. MERMIN. *Physique des solides*. EDP Sciences, 2002. [15](#)
- G. J. M. AUSTEN, J. J. DE SWART. *Improved Coulomb potential*. Phys. Rev. Lett., 1983. [132](#)
- W. A. BARKER, F. N. GLOVER. *Reduction of relativistic two-particle wave equation to approximate forms. III*. Phys. Rev., **99**(1):317, 1955. [112](#), [122](#)
- J. A. BEARDEN. *The wave-lengths of the silver, molybdenum, copper, iron and chromium  $K\alpha_1$  lines*. Phys. Rev., **43**(2):92–97, 1933. [78](#)
- J. A. BEARDEN, A. HENINS, J. G. MARZOLF, W. C. SAUDER, J. S. THOMSEN. *Precision redetermination of standard reference wavelengths for X-ray spectroscopy*. Physical Review, **135**(4A):A899–A910, 1964. [78](#)
- J. A. BEARDEN, J. S. THOMSEN. *The double-crystal X-ray spectrometer: corrections, errors, and alignment procedure*. Journal of Applied Crystallography, **4**(2):130–138, 1971. [78](#)
- P. BECKER. *Tracing the definition of the kilogram to the Avogadro constant using a silicon single crystal*. Metrologia, **40**(6):366–375, 2003. [88](#)
- P. BECKER, G. CAVAGNERO, U. KUETGENS, G. MANA, E. MASSA. *Confirmation of the INRiM and PTB determinations of the Si lattice parameter*. IEEE Trans. Instrum. Meas., **56**(2):230–234, 2007. [88](#)



- P. BECKER, K. DORENWENDT, G. EBELING, R. LAUER, W. LUCAS, R. PROBST, H. RADEMACHER, G. REIM, P. SEYFRIED, H. SIEGERT. *Absolute measurement of the (220) lattice plane spacing in a silicon crystal*. Phys. Rev. Lett., **46**(23):1540–1543, 1981. [88](#)
- P. BEIERSDORFER, M. BITTER, D. HEY, K. J. REED. *Identification of the  $1s2s2p\ ^4P_{5/2} \rightarrow 1s^22s\ ^2S_{1/2}$  magnetic quadrupole inner-shell satellite line in the  $Ar16^+$  K-shell x-ray spectrum*. Phys. Rev. A, **66**(3):032504 (7), 2002. [59](#), [60](#), [70](#)
- V. B. BERESTETSKII, E. M. LIFSHITZ, L. P. PITAEVSKII. *Quantum Electrodynamics*. Pergamon press, Oxford, 2nd edition, 1982. [108](#), [112](#), [114](#), [115](#), [117](#), [122](#), [144](#)
- H. A. BETHE, E. E. SALPETER. *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*. Springer-Verlag, 1957. [108](#), [109](#), [116](#)
- S. A. BLUNDELL. *Calculations of the screened self-energy and vacuum polarization in Li-like, Na-like and Cu-like ions*. Phys. Rev. A, **47**(3):1790–1803, 1993. [9](#)
- S. BOUCARD. *Calcul de haute précision d'énergies de transitions dans les atomes exotiques et les Lithiumoïdes : Corrections relativistes, corrections radiatives, structure hyperfine et interaction avec le cortège électronique résiduel*. Ph.D. thesis, Laboratoire Kastler Brossel, 1998. [9](#)
- J. P. BRIAND, J. P. MOSSÉ, P. INDELICATO, P. CHEVALLIER, D. GIRARD-VERNHET, A. CHÉTILOU, M. T. RAMOS, J. P. DESCLAUX. *Spectroscopy of hydrogenlike and heliumlike argon*. Phys. Rev. A, **28**(3):1413–1417, 1983. [61](#), [62](#), [63](#)
- H. BRUHNS, J. BRAUN, K. KUBIČEK, J. R. CRESPO LOPEZ-URRUTIA, J. ULLRICH. *Testing QED screening and two-loop contributions with he-like ions*. Phys. Rev. Lett., **99**(11):113001–4, 2007. [63](#), [70](#)
- G. CAVAGNERO, H. FUJIMOTO, G. MANA, E. MASSA, K. NAKAYAMA, G. ZOSI. *Erratum : Measurement repetitions of the Si(220) lattice spacing*. Metrologia, **41**:445–446, 2004a. [88](#)
- G. CAVAGNERO, H. FUJIMOTO, G. MANA, E. MASSA, K. NAKAYAMA, G. ZOSI. *Measurement repetitions of the Si(220) lattice spacing*. Metrologia, **41**(1):56–64, 2004b. [88](#)
- F. CEMBALI, R. FABBRI, M. SERVIDORI, A. ZANI, G. BASILE, G. CAVAGNERO, A. BERGAMIN, G. ZOSI. *Precise X-ray relative measurement of lattice parameters of silicon wafers by multiple-crystal Bragg-case diffractometry. Computer simulation of the experiment*. Journal of Applied Crystallography, **25**(3):424–431, 1992. [46](#)
- F. N. CHUKHOVSKII, G. HÖLZER, O. WEHRHAN, E. FÖRSTER. *Anisotropic elasticity corrections for reflection efficiency and X-ray standing-wave patterns using bent crystals*. Journal of Applied Crystallography, **29**(4):438–445, 1996. [46](#)
- C. COHEN-TANNOUJDI, B. DIU, F. LALOË. *Mécanique quantique*. Hermann, Paris, 1977. [14](#), [41](#), [145](#)
- A. H. COMPTON. *Minutes of the Washington meeting. The reflection coefficient of monochromatic X-rays from rock salt and calcite*. Phys. Rev., **10**(1):95–96, 1917. [78](#)

- A. M. COSTA, M. C. MARTINS, F. PARENTE, J. P. SANTOS, P. INDELICATO. *Dirac-Fock transition energies and radiative and radiationless transition probabilities for Ar $9^+$  to Ar $16^+$  ion levels with K-shell holes*. Atomic Data and Nuclear Data Tables, **79**(2):223–39, 2001. [58](#), [59](#), [60](#), [61](#), [63](#), [152](#)
- D. S. COVITA. *High precision spectroscopy of the 3p - 1s X-Ray transition in muonic hydrogen*. Ph.D. thesis, 2008. [74](#)
- D. S. COVITA, M. AY, S. SCHLESSER, D. GOTTA, L. M. SIMONS, E.-O. L. BIGOT, J. M. F. DOS SANTOS. *Accurate miscut angle determination for spherically bent Bragg crystals*. Rev. Sci. Instrum., **79**(3):033102, 2008. [25](#)
- J. CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, A. ARTEMYEV, J. BRAUN, G. BRENNER, H. BRUHNS, I. DRAGANIČ, A. G. MARTÍNEZ, A. LAPIERRE, V. MIRONOV, J. SCOFIELD, R. S. ORTS, H. TAWARA, M. TRINCZEK, I. TUPYTSIN, J. ULLRICH. *High precision measurements of forbidden transitions in highly charged ions at the Heidelberg EBIT*. Nucl. Instr. Methods B, **235**(1–4):85–91, 2005. [63](#)
- W. CURDT, E. LANDI, K. WILHELM, U. FELDMAN. *Wavelength measurements of heliumlike 1s2s  $^3S_1$  -1s2p  $^3P_{0,2}$  transitions in Ne $8^+$ , Na $9^+$ , Mg $10^+$ , and Si $12^+$  emitted by solar flare plasmas*. Physical Review A, **62**(2):022502, 2000. [10](#)
- B. DAVIS, H. PURKS. *Measurement of the Mo.K doublet distances by means of the double X-ray spectrometer*. Proc. Nat. Acad. Sci., **13**(6):419–422, 1927. [78](#)
- B. DAVIS, W. M. STEMPEL. *An experimental study of the reflection of X-rays from calcite*. Phys. Rev., **17**(5):608–623, 1921. [78](#)
- J. P. DESCLAUX. *A multiconfiguration relativistic Dirac-Fock program*. Computer Physics Communications, **9**(1):31, 1975. [9](#), [152](#)
- J. P. DESCLAUX. *A relativistic multiconfiguration Dirac-Fock package*. In E. CLEMENTI (editor), *Methods and Techniques in Computational Chemistry*, volume A: Small Systems of METTEC, p. 253. STEF, Cagliari, 1993. [152](#)
- J. P. DESCLAUX, J. DOLBEAULT, M. J. ESTEBAN, P. INDELICATO, E. SÉRÉ. *Computational approaches of relativistic models in quantum chemistry*. In C. LE BRIS, M. DE FRANCESCHI (editors), *Computational Chemistry*, volume X of *Handbook of Numerical Analysis*, p. 1032. Elsevier, 2003. [152](#)
- J. P. DESCLAUX, D. F. MAYERS, F. O'BRIEN. *Relativistic atomic wave functions*. J. Phys. B, **4**(5):631–642, 1971. [9](#)
- S. DESER, M. L. GOLDBERGER, K. BAUMANN, W. THIRRING. *Energy level displacements in pi-mesonic atoms*. Phys. Rev., **96**(3):774–776, 1954. [109](#)
- R. DESERIO, H. G. BERRY, R. L. BROOKS, J. HARDIS, A. E. LIVINGSTON, S. J. HINTERLONG. *2s - 2p transitions in heliumlike ions*. Phys. Rev. A, **24**(4):1872–1888, 1981. [67](#)
- R. D. DESLATTES. *Single axis, two crystal X-ray instrument*. Review of Scientific Instruments, **38**(6):815–820, 1967. [78](#)

- R. D. DESLATTES, H. F. BEYER, F. FOLKMANN. *Precision X-ray wavelength measurements in heliumlike argon recoil ions*. J. Phys. B: At. Mol. Phys., **17**(21):L689–L694, 1984. [61](#), [62](#), [63](#)
- R. D. DESLATTES, C. T. CHANTLER. *Systematic corrections in Bragg x-ray diffraction of flat and curved crystals*. Rev. Sci. Instrum., **66**(11):5123–5147, 1995. [16](#), [32](#)
- R. D. DESLATTES, E. G. KESSLER, W. C. SAUDER, A. HENINS. *Remeasurement of g-Ray Reference Lines*. Annals of Physics, **129**(2):378–434, 1980. [78](#)
- P. A. M. DIRAC. *The quantum theory of the electron*. Proc. R. Soc., **117**(778):610–624, 1928a. [3](#), [107](#)
- P. A. M. DIRAC. *The quantum theory of the electron. Part II*. Proc. R. Soc., **118**(779):351, 1928b. [3](#), [107](#)
- G. W. F. DRAKE. *Theoretical energies for the  $n = 1$  and 2 states of the helium isoelectronic sequence up to  $Z = 100$* . Canadian Journal of Physics, **66**(7):586–611, 1987. [70](#)
- F. J. DYSON. *The radiation theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman*. Physical Review, **75**(3):486–502, 1949a. [4](#)
- F. J. DYSON. *The S matrix in quantum electrodynamics*. Physical Review, **75**(11):1736–1755, 1949b. [4](#)
- F. J. DYSON. *Divergence of Perturbation Theory in Quantum Electrodynamics*. Physical Review, **85**(4):631–632, 1952. [4](#)
- W. EHRENBERG, H. MARK. *Über die natürliche breite der röntgenemissionslinien. I*. Z. f. Phys., **42**(11–12):807, 1927. [78](#)
- W. EHRENBERG, G. V. SUSICH. *Über die natürliche breite der röntgenemissionslinien. II*. Z. f. Phys., **42**(11–12):823, 1927. [78](#)
- M. I. EIDES, H. GROTCHE, V. A. SHELYUTO. *Theory of light hydrogenlike atoms*. Phys. Rep., **342**(2–3):63, 2001. [109](#), [116](#), [122](#), [124](#)
- A. EINSTEIN. *Über einen die erzeugung und verwandlung des lichtes betreffenden heuristischen gesichtspunkt*. Ann. der Phys., **322**(6):132–148, 1905a. [3](#)
- A. EINSTEIN. *Zur elektrodynamik bewegter körper*. Ann. der Phys., **322**(10):891–921, 1905b. [3](#)
- T. E. O. ERICSON, B. LOISEAU, S. WYCECH. *A phenomenological  $\pi^- p$  scattering length from pionic hydrogen*. Phys. Lett. B, **594**(1–2):76–86, 2004. [5](#), [110](#), [134](#)
- R. P. FEYNMAN. *Space-time approach to quantum electrodynamics*. Physical Review, **76**(6):769–789, 1949a. [4](#)
- R. P. FEYNMAN. *The theory of positrons*. Physical Review, **76**(6):749–768, 1949b. [4](#)
- V. FOCK. *Zur schrödingerschen wellenmechanik*. Z. f. Phys., **38**(3):242–250, 1926. [3](#), [107](#)

- J. L. FRIAR, J. MARTORELL, D. W. L. SPRUNG. *Nuclear sizes and the isotope shift*. Phys. Rev. A, **56**(6):4579–4586, 1997. [112](#), [113](#), [122](#)
- L. W. FULLERTON, G. A. RINKER. *Accurate and efficient methods for the evaluation of vacuum-polarization potentials of order  $Z\alpha$  and  $Z\alpha^2$* . Phys. Rev. A, **13**(3):1283–1287, 1976. [132](#)
- J. GASSER, V. E. LYUBOVITSKIJ, A. RUSETSKY. *Hadronic atoms in QCD + QED*. Phys. Rep., **456**(5–6):167–251, 2008. [5](#), [110](#), [134](#)
- W. GERLACH, O. STERN. *Das magnetische moment des silberatoms*. Z. f. Phys., **9**(1):353–355, 1922. [3](#)
- O. GORCEIX, P. INDELICATO, J. P. DESCLAUX. *Multiconfiguration Dirac-Fock studies of two-electron ions. I. Electron-electron interaction*. J. Phys. B: At. Mol. Phys., **20**(4):639–650, 1987. [9](#)
- W. GORDON. *Der Comptoneffekt nach der Schrödingerschen Theorie*. Z. f. Phys., **40**(1–2):117–133, 1926. [3](#), [107](#)
- D. GOTTA. *Precision spectroscopy of light exotic atoms*. Progr. Part. Nucl. Physics, **52**(1):133–195, 2004. [5](#), [106](#), [134](#)
- D. GOTTA, F. AMARO, D. F. ANAGNOSTOPOULOS, S. BIRI, D. S. COVITA, H. GORKE, A. GRUBER, M. HENNEBACH, A. HIRTL, T. ISHIWATARI, P. INDELICATO, T. JENSEN, E.-O. L. BIGOT, J. MARTON, M. NEKIPELOV, J. M. F. DOS SANTOS, S. SCHLESSER, P. SCHMID, L. M. SIMONS, T. STRAUCH, M. TRASSINELLI, J. F. C. A. VELOSO, J. ZMESKAL. *Pionic hydrogen*. In *Precision physics of simple atoms and molecules*, volume 745 of *Lecture Notes in Physics*, pp. 165–186. Springer Berlin / Heidelberg, 2008. [105](#), [106](#), [110](#), [132](#), [134](#)
- D. GOTTA, D. F. ANAGNOSTOPOULOS, M. AUGSBURGER, G. BORCHERT, C. CASTELLI, D. CHATELLARD, J. P. EGGER, P. EL-KHOURY, H. GORKE, P. HAUSER, P. INDELICATO, K. KIRCH, S. LENZ, T. SIEMS, L. M. SIMONS. *Balmer  $\alpha$  transitions in antiprotonic hydrogen and deuterium*. Nucl. Phys. A, **660**(3):283–321, 1999. [24](#)
- I. P. GRANT, B. J. MCKENZIE, P. H. NORRINGTON, D. F. MAYERS, N. C. PYPER. *An atomic multiconfigurational Dirac-Fock package*. Computer Physics Communications, **21**(2):207–231, 1980. [9](#)
- J. GREINER, W. RIEHARDT. *Quantum Electrodynamics*. Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag, 2003. [114](#), [144](#)
- I. HENINS, J. A. BEARDEN. *Silicon-crystal determination of the absolute scale of X-ray wavelengths*. Physical Review, **135**(4A):A890–A898, 1964. [78](#)
- P. INDELICATO. *Multiconfiguration Dirac-Fock calculations of transition energies in two electron ions with  $10 \leq Z \leq 92$* . Nucl. Instr. Methods B, **31**(1–2):14, 1988. [9](#)
- P. INDELICATO. *Correlation and Negative Continuum effects for the relativistic M1 transition in two-electron ions using the multiconfiguration Dirac-Fock method*. Phys. Rev. Lett., **77**(16):3323–3326, 1996. [152](#)

- P. INDELICATO, 2008. Résultats non publiés obtenus avec MCDFGME [INDELICATO and DESCLAUX 2005], code développé par [DESCLAUX 1975], [INDELICATO ET AL. 1987], [INDELICATO and DESCLAUX 1990], [DESCLAUX 1993], [INDELICATO and MOHR 1995], [INDELICATO 1996], [MARTINS ET AL. 2001], [COSTA ET AL. 2001], [DESCLAUX ET AL. 2003]. 58, 59, 60, 64, 65, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74
- P. INDELICATO, S. BOUCARD, D. S. COVITA, D. GOTTA, A. GRUBER, A. HIRTL, H. FUHRMANN, E.-O. LE BIGOT, S. SCHLESSER, J. M. F. DOS SANTOS, L. M. SIMONS, L. STINGELIN, M. TRASSINELLI, J. VELOSO, A. WASSER, J. ZMESKAL. *Highly charged ion X-rays from Electron-Cyclotron Resonance Ion Sources*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, **580**(1):8–13, 2007. 72
- P. INDELICATO, J. P. DESCLAUX. *Multiconfiguration Dirac-Fock calculations of transition energies with QED corrections in three-electron ions*. Phys. Rev. A, **42**(9):5139–5149, 1990. 9, 152
- P. INDELICATO, J. P. DESCLAUX. *MCDFGME, a MultiConfiguration Dirac Fock and General Matrix Elements program (release 2005)*, 2005. URL <http://dirac.spectro.jussieu.fr/mcdf>. 152
- P. INDELICATO, O. GORCEIX, J. P. DESCLAUX. *Multiconfigurational Dirac-Fock studies of two-electron ions. II. Radiative corrections and comparison with experiment*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, **20**(4):651, 1987. 9, 152
- P. INDELICATO, P. J. MOHR. *Asymptotic expansion of the Dirac–Coulomb Green function*. J. Math. Phys., **36**(2):714–724, 1995. 152
- P. INDELICATO, P. J. MOHR. *Coordinate-space approach to the bound-electron self-energy: Self-energy screening calculation*. Phys. Rev. A, **63**(5):052507, 2001. 9
- C. ITZYKSON, J.-B. ZUBER. *Quantum Field Theory*. McGraw-Hill, 1980. 114, 115, 124, 144
- B. JECKELMANN. *BIPA: Ein programm zur Berechnung von Bindungsenergien in pionischen Atomen*. Technical Report ETHZ-IMP LB-85-03, Institut de Physique de l’université de Fribourg, Suisse, 1985. 124, 132
- U. D. JENTSCHURA, G. SOFF, P. INDELICATO. *Breit Hamiltonian and quantum electrodynamic effects for spinless particles*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **35**(11):2459–2468, 2002. 125
- H. H. JOHANN. *Die erzeugung lichtstarker röntgenspektren mit hilfe von konkavkristallen*. Z. f. Phys., **69**(3–4):185–206, 1931. 16
- W. R. JOHNSON, M. IDREES, J. SAPIRSTEIN. *Second-order energies and third-order matrix elements of alkali-metal atoms*. Phys. Rev. A, **35**(8):3218–3226, 1987. 9
- W. R. JOHNSON, J. SAPIRSTEIN. *Computation of second-order many-body corrections in relativistic atomic systems*. Phys. Rev. Lett., **57**(9):1126–1129, 1986. 9
- W. R. JOHNSON, G. SOFF. *Relativistic many-body approach to the photoionization of cesium*. Phys. Rev. Lett., **50**(18):1361–1364, 1983. 9

- G. KÄLLÉN, A. SABRY. *Fourth order vacuum polarization*. K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat-fys. Medd., **29**(17):1–20, 1955. [119](#)
- T. R. KALLMAN, P. PALMERI. *Atomic data for x-ray astrophysics*. Reviews of Modern Physics, **79**(1):79–133, 2007. [10](#)
- T. KATO, U. I. SAFRONOVA, A. S. SHLYAPTSEVA, M. CORNILLE, J. DUBAU, J. NILSEN. *Comparison of satellite spectra for H-like Fe and He-like Fe, Ca, and S calculated by three different methods*. Atomic Data and Nuclear Data Tables, **67**(2):225–329, 1997. [66](#), [67](#)
- H. P. KELLY. *Correlation effects in atoms*. Phys. Rev., **131**(2):684–699, 1963. [9](#)
- H. P. KELLY. *Many-body perturbation theory applied to atoms*. Phys. Rev., **136**(3B):B896–B912, 1964. [9](#)
- E. G. KESSLER, R. D. DESLATTES, D. GIRARD, W. SCHWITZ, L. JACOBS, O. RENNER. *Mid-to-high-Z precision x-ray measurements*. Physical Review A, **26**(5):2696–2706, 1982. [78](#)
- L. KHRIPLOVICH, A. MILSTEIN, R. SEN'KOV. *Nature of the darwin term and  $(z\alpha)^4 m^3 / m^2$  contribution to the lamb shift for an arbitrary spin of the nucleus*. Phys. Lett. A, **221**(6):370–374, 1996. [112](#)
- O. KLEIN. *Quantentheorie und fünfdimensionale relativitätstheorie*. Z. f. Phys., **37**(12):895–906, 1926. [3](#), [107](#)
- KOBA, TATI, S. TOMONAGA. *On a relativistically invariant formulation of the quantum theory of wave fields. II - Case of interacting electromagnetic and electron fields -*. Progr. Theoret. Phys. (Kyoto), **2**(3):101–116, 1947a. [4](#)
- KOBA, TATI, S. TOMONAGA. *On a relativistically invariant formulation of the quantum theory of wave fields. III - Case of interacting electromagnetic and electron fields -*. Progr. Theoret. Phys. (Kyoto), **2**(4):198–208, 1947b. [4](#)
- KOBA, S. TOMONAGA. *On radiation reactions in collision processes. I - Application of the « self-consistent » subtraction method to the elastic scattering of an electron -*. Progr. Theoret. Phys. (Kyoto), **3**(3):290–303, 1948. [4](#)
- E. KRÜGER, W. NISTLER, W. WEIRAUCH. *Re-evaluation of a precise measurement of  $h/m_n$* . Metrologia, **36**(2):147–148, 1998. [88](#)
- P. KUSCH, H. M. FOLEY. *The magnetic moment of the electron*. Phys. Rev., **74**(3):250–263, 1948. [3](#)
- W. E. LAMB, R. C. RETHERFORD. *Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method*. Phys. Rev., **72**(3):241–243, 1947. [3](#), [107](#)
- W. E. LAMB, R. C. RETHERFORD. *Fine structure of the hydrogen atom. Part I*. Phys. Rev., **79**(4):549–572, 1950. [3](#), [107](#)
- I. LINDGREN, S. SALOMONSON, B. ÅSÉN. *The covariant-evolution-operator method in bound-state QED*. Phys. Rep., **389**(4):161–261, 2004. [9](#)



- E. LINDROTH, 2009. Calculs non publiés de l'effet Auger pour les transitions lithiu-moïdes  $1s\ 2s\ 2p\ ^2P_{3/2},\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ 2s^2S_{1/2}$  dans l'argon. 59, 60, 72, 73
- V. E. LYUBOVITSKIJ, A. RUSETSKY.  $\pi^- p$  atom in ChPT: strong energy-level shift. Phys. Lett. B, 494(1-2):9–18, 2000. 5, 109, 110, 112, 126, 131, 132, 133, 134
- J. MARTIN, U. KUETGENS, J. STÜMPEL, P. BECKER. The silicon lattice parameter - an invariant quantity of nature? Metrologia, 35(6):811–817, . 88
- M. C. MARTINS, A. M. COSTA, J. P. SANTOS, P. INDELICATO, F. PARENTE. Interpretation of X-Ray spectra emitted by Ar ions in an Electron Cyclotron Resonance Ion Source. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 34(4):533–543, 2001. 152
- P. J. MOHR, B. N. TAYLOR, D. B. NEWELL. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2006. Rev. Mod. Phys., 80(2):633–727, 2008. 49, 88, 111
- J. E. NAFE, E. B. NELSON, I. I. RABI. The hyperfine structure of atomic hydrogen and deuterium. Phys. Rev., 71(12):914–915, 1947. 4
- K. NAKAYAMA, H. FUJIMOTO. Progress in the measurement of lattice spacing  $d(220)$  of silicon. IEEE Trans. Instrum. Meas., 46(2):580–583, 1997. 88
- Y. OKADA, Y. TOKUMARU. Precise determination of lattice parameter and thermal expansion coefficient of silicon between 300 and 1500 K. J. Appl. Phys., 56(2):314, 1984. 88
- D. A. OWEN. On quantum electrodynamics of two-particle bound states containing spinless particles. Found. Phys., 24(2):273, 1994. 112, 113
- K. PACHUCKI. Nuclear-spin-dependent recoil correction to the Lamb shift. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 28(7):L221–L224, 1995a. 112
- K. PACHUCKI. Radiative recoil corrections to the Lamb shift. Phys. Rev. A, 52(2):1079–1085, 1995b. 124
- K. PACHUCKI. Theory of the Lamb shift in muonic hydrogen. Phys. Rev. A, 53(4):2092, 1996. 110, 118
- K. PACHUCKI. Simple derivation of helium Lamb shift. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 31(23):5123–5133, 1999. 125
- K. PACHUCKI. Nuclear mass correction to the magnetic interaction of atomic systems. Phys. Rev. A, 78(1):012504, 2008. 112
- J. M. PAROS, L. WEISBORD. How to design flexure hinges. Machine Design, 25:151–156, 1965. 91
- L. G. PARRATT. Design of a double-crystal X-ray vacuum spectrometer. Phys. Rev., 41(5):553, 1932. 78
- F. PASCHEN. Ueber die zum funkenübergang in luft, wasserstoff und kohlendioxid bei verschiedenen drucken erforderliche potentialdifferenz. Ann. der Phys., 273(5):69–96, 1889. 95

- W. PAULI. *Über den einfluß der geschwindigkeitsabhängigkeit der elektronenmasse auf den zee-maneeffekt.* Z. f. Phys., **31**(1):373–385, 1925. [3](#)
- N. J. PEACOCK, R. BARNSLEY, M. G. O'MULLANE, M. R. TARBUTT, D. CROSBY, J. D. SILVER, J. A. RAINNIE. *Ionization balance in EBIT and tokamak plasmas.* Rev. Sci. Instrum., **72**:1250–1255, 2001. [10](#)
- M. E. PESKIN, D. V. SCHROEDER. *An introduction to quantum field theory.* Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1995. [114](#), [115](#), [117](#), [123](#)
- M. PLANCK. *Ueber das gesetz der energieverteilung im normalspectrum.* Ann. der Phys., **309**(3):553–563, 1900. [3](#)
- D. R. PLANTE, W. R. JOHNSON, J. SAPIRSTEIN. *Relativistic all-order many-body calculations of the  $n=1$  and  $n=2$  states of heliumlike ions.* Phys. Rev. A, **49**(5):3519, 1994. [9](#), [61](#), [62](#), [63](#), [66](#), [67](#), [70](#)
- N. SADEGHI, T. NAKANO, D. J. TREVOR, R. A. GOTTSCHO. *Ion transport in an electron cyclotron resonance plasma.* J. Appl. Phys., **70**(5):2552–2569, 2004. [23](#)
- U. I. SAFRONOVA, M. S. SAFRONOVA. *Relativistic many-body calculations of E1, E2, M1, and M2 transitions rates for the  $1s\ 2l'\ 2l'' - 1s^2\ 2l$  lines in Li-like ions.* Molecular Physics, **102**(11–12):1331–1344, 2004. [9](#), [59](#), [60](#), [64](#), [65](#), [68](#), [69](#)
- E. E. SALPETER. *Mass corrections to the fine structure of hydrogen-like atoms.* Phys. Rev., **87**(2):328–343, 1952. [111](#), [125](#)
- M. SÀNCHEZ DEL RÌO, R. J. DEJUS. *XOP 2.1 – a new version of the X-ray optics software toolkit.* In *Synchrotron Radiation Instrumentation: Eighth International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation*, volume 705, pp. 784–787, 2004. [35](#), [83](#)
- J. SAPIRSTEIN, K. T. CHENG. *Hydrogenic and screened self-energies for d states.* Phys. Rev. A, **73**(1):012503–1 – 012503–7, 2006. [9](#)
- L. SCHLEINKOFER, F. BELL, H. D. BETZ, G. TROLMAN, J. ROTHERMEL. *Precision wavelength determination of  $2^1P_1 - 1^1S_0$  and  $2^3P_1 - 1^1S_0$  transitions in heliumlike sulfur.* Physica Scripta, **25**(6B):917–923, 1982. [66](#)
- H.-C. SCHRÖDER, A. BADERTSCHER, P. GOUDSMIT, M. JANOUSCH, H. LEISI, E. MATSINOS, D. SIGG, Z. ZHAO, D. CHATELLARD, J.-P. EGGER, K. GABATHULER, P. HAUSER, L. SIMONS, A. R. E. HASSANI. *The pion nucleon scattering lengths from pionic hydrogen and deuterium.* Eur. Phys. J. C, **21**(3):473–488, 2001. [134](#)
- E. SCHRÖDINGER. *Über das verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen quantenmechanik zu der meinem.* Ann. der Phys., **384**(8):734–756, 1926a. [3](#)
- E. SCHRÖDINGER. *An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules.* Phys. Rev., **28**(6):1049–1070, 1926b. [3](#)
- J. SCHWINGER. *On quantum-electrodynamics and the magnetic moment of the electron.* Physical Review, **73**:416–417, 1948a. [4](#)



- J. SCHWINGER. *Quantum electrodynamics. I. A covariant formulation.* Physical Review, **74**(10):1439–1461, 1948b. 4
- J. SCHWINGER. *Quantum electrodynamics. II. Vacuum polarization and self-energy.* Physical Review, **75**(4):651–679, 1949a. 4
- J. SCHWINGER. *Quantum electrodynamics. III. the electromagnetic properties of the electron*—*radiative corrections to scattering.* Physical Review, **76**(6):790–817, 1949b. 4
- J. SCHWINGER (editor). *Selected papers on quantum electrodynamics.* Dover Publications, Inc., New York, 1958. 4
- G. SENEMAUD. *Mesure de l'affaiblissement du rayonnement X par le béryllium, le carbone et différents plastiques entre 4 et 17,5 Å.* Journal de Physique, **30**(10):811–818, 1969. 95
- D. SIGG, A. BADERTSCHER, P. F. A. GOUDSMIT, H. J. LEISI, G. C. OADES. *Electromagnetic corrections to the s-wave scattering lengths in pionic hydrogen.* Nucl. Phys. A, **609**(3):310–325, 1996. 5, 109, 110, 126, 131, 132, 133, 134
- M. R. TARBUTT, R. BARNSELY, N. J. PEACOCK, J. D. SILVER. *Wavelength measurements of the satellite transitions to the n= 2 resonance lines of helium-like argon.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **34**(20):3979–3991, 2001. 58, 59, 60, 70, 72
- TATI, S. TOMONAGA. *A self-consistent subtraction method in the quantum field theory, I.* Progr. Theoret. Phys. (Kyoto), **3**(4):391–406, 1948. 4
- S. TOMONAGA. *On a relativistically invariant formulation of the quantum theory of wave fields.* Progr. Theoret. Phys. (Kyoto), **1**(2):27–42, 1946. 4
- M. TRASSINELLI. *Tests d'électrodynamique quantique et étalons de rayons-X à l'aide des atomes pioniques et des ions multichargés.* Ph.D. thesis, 2005. 23, 112
- M. TRASSINELLI, C. DAVID, D. GOTTA, M. HENNEBACH, P. INDELICATO, E.-O. LE BIGOT, N. NELMS, L. M. SIMONS. *Characterization of a charge-coupled device array for Bragg spectroscopy.* Rev. Sci. Instrum., **77**(4):043107, 2006. 34
- M. TRASSINELLI, P. INDELICATO. *Relativistic calculations of pionic and kaonic atoms' hyperfine structure.* Phys. Rev. A, **76**(1):012510–7, 2007. 130
- G. E. UHLENBECK, S. GOUDSMIT. *Spinning electrons and the structure of spectra.* Nature, **117**:264–265, 1926. 3
- L. A. VAINSHTEIN, T. G. LISINA. *Atomic constants of autoionization states of ions with Z= 6,8,10 – 42 in the Be isoelectronic sequence.* Atomic Data and Nuclear Data Tables, **24**(1):49–93, 1979. 58
- L. A. VAINSHTEIN, U. I. SAFRONOVA. *Wavelengths and transition probabilities of satellites to resonance lines of H- and He-like ions.* Atomic Data and Nuclear Data Tables, **21**(1):49–68, 1978. 58
- V. A. YEROKHIN, A. N. ARTEMYEV, T. BEIER, V. M. SHABAEV, G. SOFF. *Calculation of the screened self-energy and vacuum-polarization corrections in high-Z lithium-like ions.* Phys. Scr., **T80B**:495–497, 1999. 9



## Résumé

Nous abordons trois sujets concernant la physique des atomes. Le premier sujet présente une nouvelle méthode d'analyse de spectres X des ions d'argon, de soufre et de chlore très chargés (2 à 4 électrons), dans le cadre d'une expérience située à l'Institut Paul Scherrer utilisant un spectromètre à cristal courbe. Elle s'appuie sur la reproduction de l'expérience à l'aide d'une simulation basée sur le tracé de rayons, ce qui permet de reproduire le lien entre spectres et énergies de transitions. Nous expliquons comment l'agencement géométrique des rayons X réfléchis par le cristal donne lieu aux raies de transitions détectées. Nous présentons les caractéristiques du spectromètre. Nous expliquons la méthode d'analyse ; nous démontrons que la prise en compte de la répartition d'intensité de la source est essentielle et nous établissons la liste des paramètres critiques entrant en jeu. Enfin, nous établissons la liste des résultats et les comparons aux autres valeurs expérimentales et aux valeurs théoriques. Le second sujet présente la mise en place sur une source à plasma située à Jussieu au Laboratoire Kastler Brossel d'un spectromètre à deux cristaux plans dans le but d'obtenir des valeurs absolues pour les transitions ayant lieu dans des ions très chargés. Nous expliquons le principe fondamental, nous abordons la question de l'analyse des données, nous détaillons ensuite les caractéristiques techniques en présentant les étapes de l'élaboration de ce spectromètre et enfin nous présentons les premiers résultats. Le dernier sujet porte sur les calculs de QED des niveaux d'énergies de l'hydrogène pionique, qui est un atome exotique constitué d'un proton et d'un pion. Le pion est de masse et de taille comparable à celle du proton, et de spin nul. C'est également un hadron, c'est-à-dire une particule capable d'interagir avec le proton via l'interaction forte. Nous expliquons comment la détermination théorique de la contribution électromagnétique aux niveaux d'énergies, associée aux résultats expérimentaux obtenus à l'Institut Paul Scherrer permet de déduire les valeurs des longueurs de diffusions hadroniques, pour lesquelles les prévisions théoriques issues de différents points de vues sont en désaccord. Nous présentons ensuite les calculs où les particularités du système entrent en jeu et enfin nous illustrons l'influence de nos résultats sur les valeurs des longueurs de diffusions.

**Mots-clés :** niveaux d'énergie atomiques, spectroscopie, QED, rayons X, atomes exotiques, hydrogène pionique, ions multichargés, Hamiltonien de Breit-Pauli, MCDFGME, interaction forte, standards de rayons X.

---

## Abstract

We get onto three topics about atomic physics.

The first one presents a new method to analyse X-rays spectra of highly charged (2 to 4 electrons) ions of argon, sulfur and chlorine, obtained at the Paul Scherrer Institute. It is based on reproducing the experiment using ray tracing simulation, which allows to reproduce the link between the energies and the spectrum picture. We explain how the geometrical layout of X-rays reflected by the crystal build the detected transition lines, and present the spectrometer features. We explain the analysis method ; we show that the intensity distribution of the source must be taken into account and we list the critical parameters. We summarize the results and compare them to experimental and theoretical values.

The second topic deals with the set up of a double crystal spectrometer on an ECR source at the Laboratoire Kastler Brossel, in order to obtain absolute values for highly charged ions transitions. We explain the fundamental concept and discuss the matter of data analysis. We detail technical features and steps of development and show the first results.

The last topic concerns QED calculations for energy levels in pionic hydrogen, which is an exotic atom made up of a proton and a pion. The pion spin is null, and its mass and size are comparable to proton ones. It is a hadron too, which means that it can interact with the proton through strong interaction. We explain how the calculation of electromagnetic contribution to energy levels associated to experimental results obtained at the Paul Scherrer Institute allows us to find hadronic scattering lengths, for which theoretical predictions coming from different points of view are in disagreement. We show the calculations where the specific features of such a system play a role. We illustrate the consequences of our results on scattering lengths.

**Keywords:** atomic energy levels, spectroscopy, QED, X rays, exotic atoms, pionic hydrogen, highly charged ions, Breit-Pauli Hamiltonian, MCDFGME, strong interaction, X-ray standards.