

Les interactions électron - matière

Les émissions électronique et photonique

P. Jonnard

Laboratoire de Chimie Physique – Matière et Rayonnement

UPMC – CNRS

Paris

Remerciements: Jacky RUSTE, Christiane BONNELLE

Vaste sujet!

Les électrons peuvent prendre toute une gamme d'énergie

- ≈ 0 eV (électrons de conduction dans un métal)
- qq eV à qq keV (canon à électrons)
- qq MeV à qq GeV (accélérateurs)
- qq eV à qq TeV et même plus! (rayonnement cosmique)

La matière existe sous différentes formes

- solide
- liquide
- gaz
- plasma
- matière noire, ...

Toutes les combinaisons d'interaction entre électrons de toutes les énergies avec n'importe quelle forme de matière est *a priori* envisageable, donnant lieu à l'étude de toutes sorte de particules de toutes les énergies possibles.

Limitation au cas du MEB et de la microsonde électronique

Les électrons ont une énergie de qq keV: 0,1 keV à 50 keV

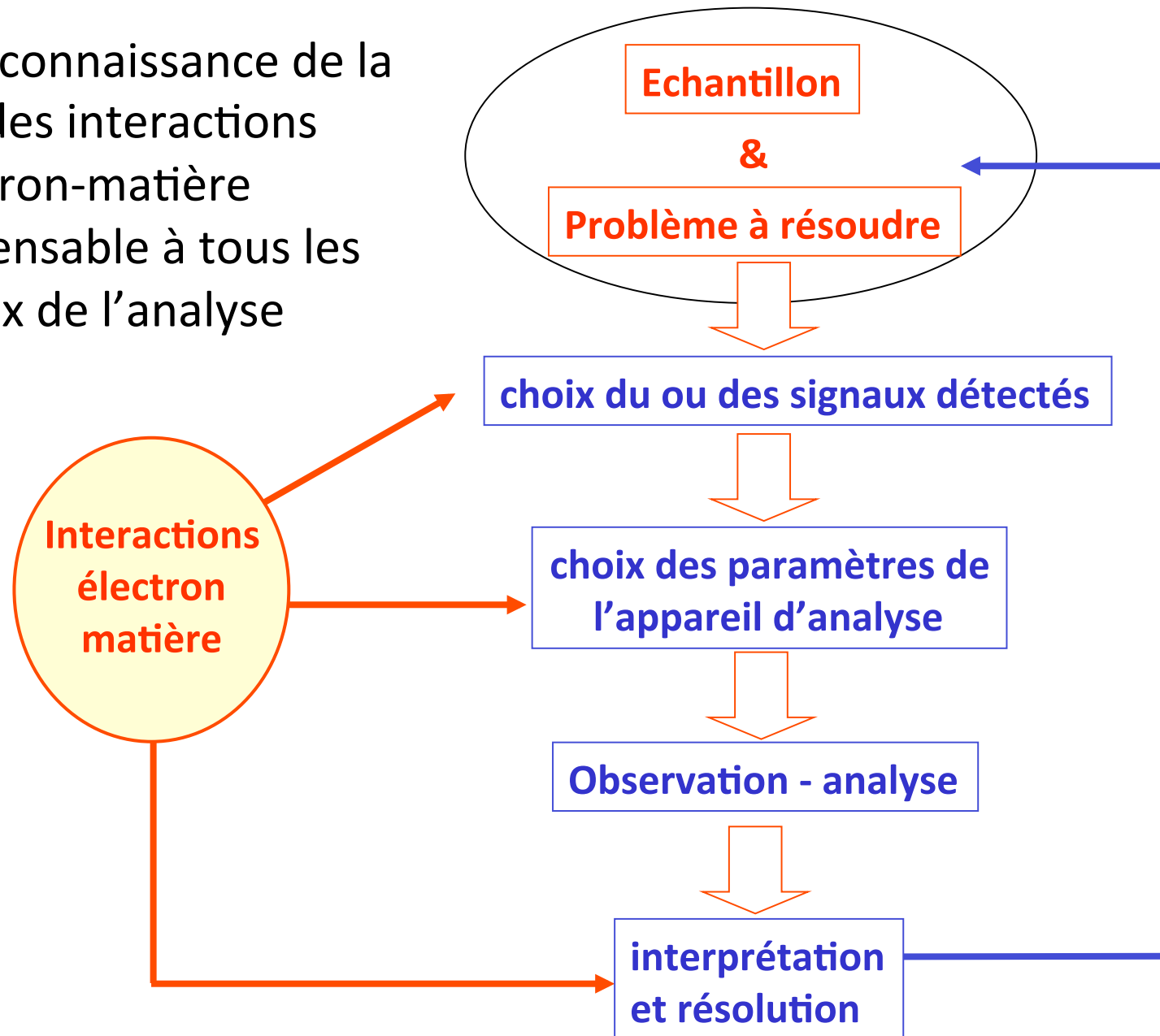
La matière est solide: métal, semiconducteur, isolant,
mou, biologique, ...

Les particules détectées sont: électrons et photons en fonction de

- leur provenance
 - l'énergie
 - l'angle

La particule incidente n'est pas un photon X:
on ne considère pas le cas - des détecteurs de rayonnement X
- de la fluorescence X

Une bonne connaissance de la nature des interactions électron-matière est indispensable à tous les niveaux de l'analyse



Notion de section efficace

Macroscopiquement

la section efficace d'une cible est la partie de sa surface qui peut être touchée par un projectile

Exemple: une cible sphérique de rayon a
offre une section efficace πa^2 à un projectile ponctuel

Microscopiquement

Que veut dire qu'un projectile a touché sa cible?

La valeur de la section efficace dépend de:

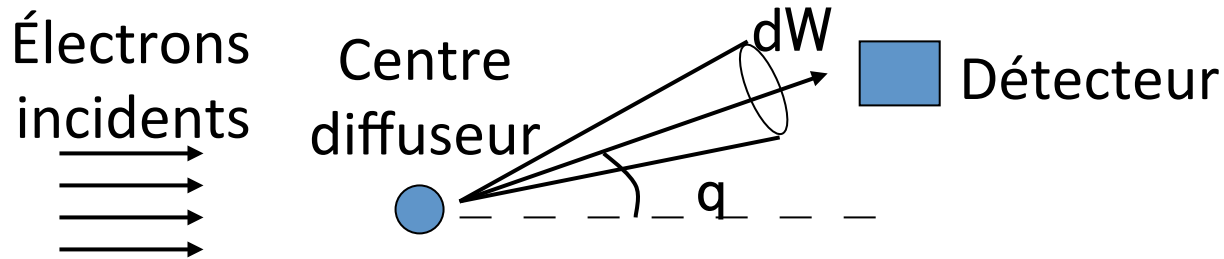
- la particule-cible
- la particule-projectile
- leur vitesse respective
- **leur interaction physique**



Section efficace d'ionisation, de diffusion, d'absorption, ...

Chaque processus a sa section efficace

Section efficace : définition



section efficace = probabilité d'interaction
entre l'électron et la particule de la cible
par unité de parcours de l'électron

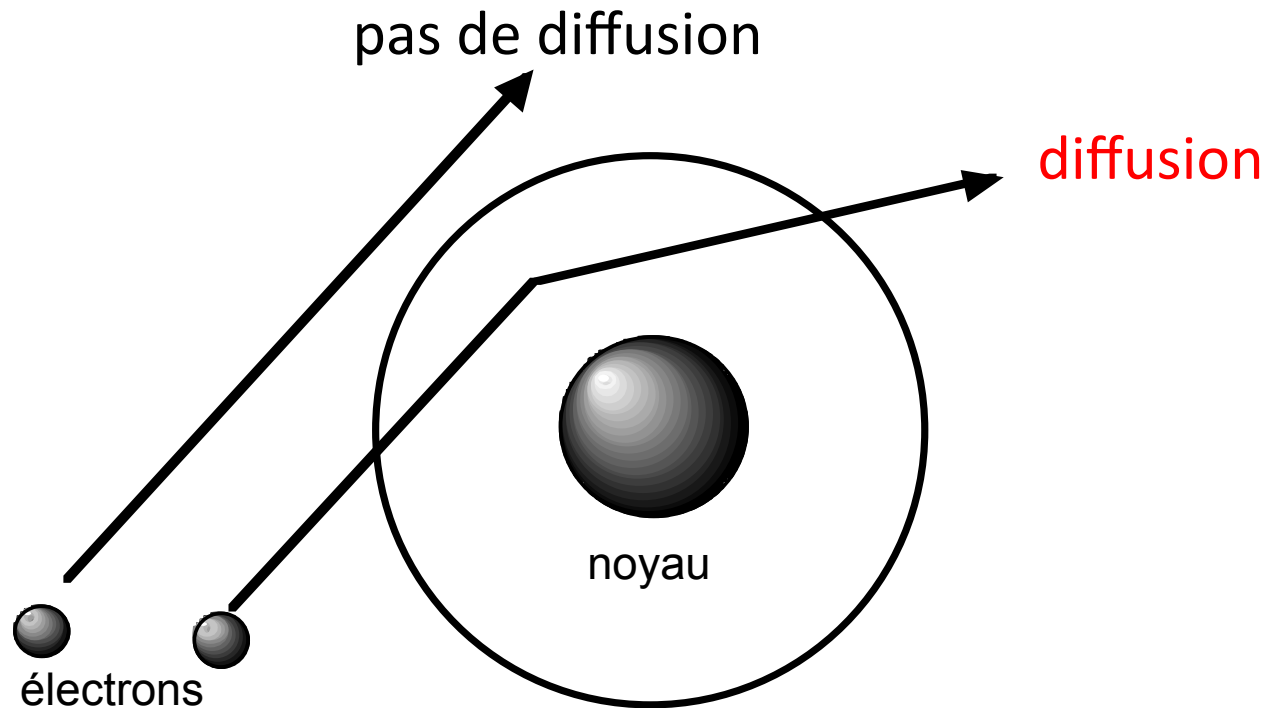
$$\sigma = \frac{n}{N J} \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{Nombre de diffusions (L}^{-3} \text{s}^{-1}) \\ \text{Flux d'électrons (L}^{-2}\text{s}^{-1}) \end{array} \quad \text{L}^2$$

Nombre de centres diffusants (L⁻³)

Hypothèse courant faible:

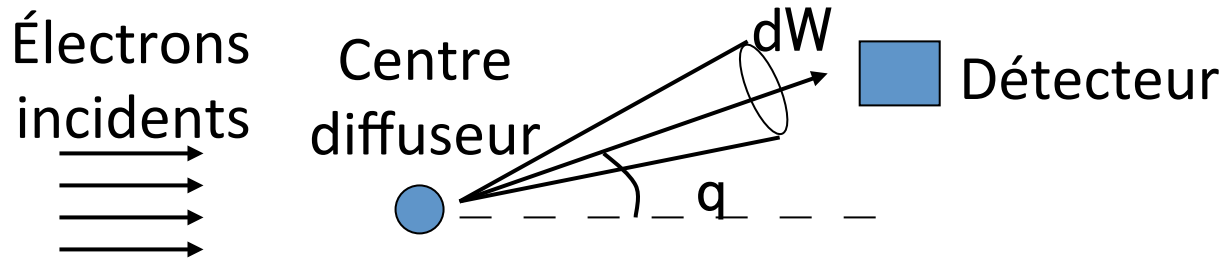
les électrons incidents n'interagissent pas entre eux

Notion de section efficace



Section efficace = aire du cercle
≠ dimension physique du centre diffusant

Section efficace différentielle



σ est la **section efficace totale** liée à une interaction particulière (diffusion élastique, interaction inélastique, ...).


Elle indique « l'intensité de l'interaction » dans son ensemble.

Section efficace différentielle: on veut connaître l'importance de l'interaction pour une valeur particulière de l'angle de diffusion, de la perte d'énergie, ...

Diffusion **angulaire** $\sigma(\theta) = \frac{d\sigma}{d\theta}$ $\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\theta} d\theta$

Diffusion en **énergie** $\sigma(E) = \frac{d\sigma}{dE}$ $\sigma = \int \frac{d\sigma}{dE} dE$

Libre parcours moyen

Une interaction i  une section efficace s_i

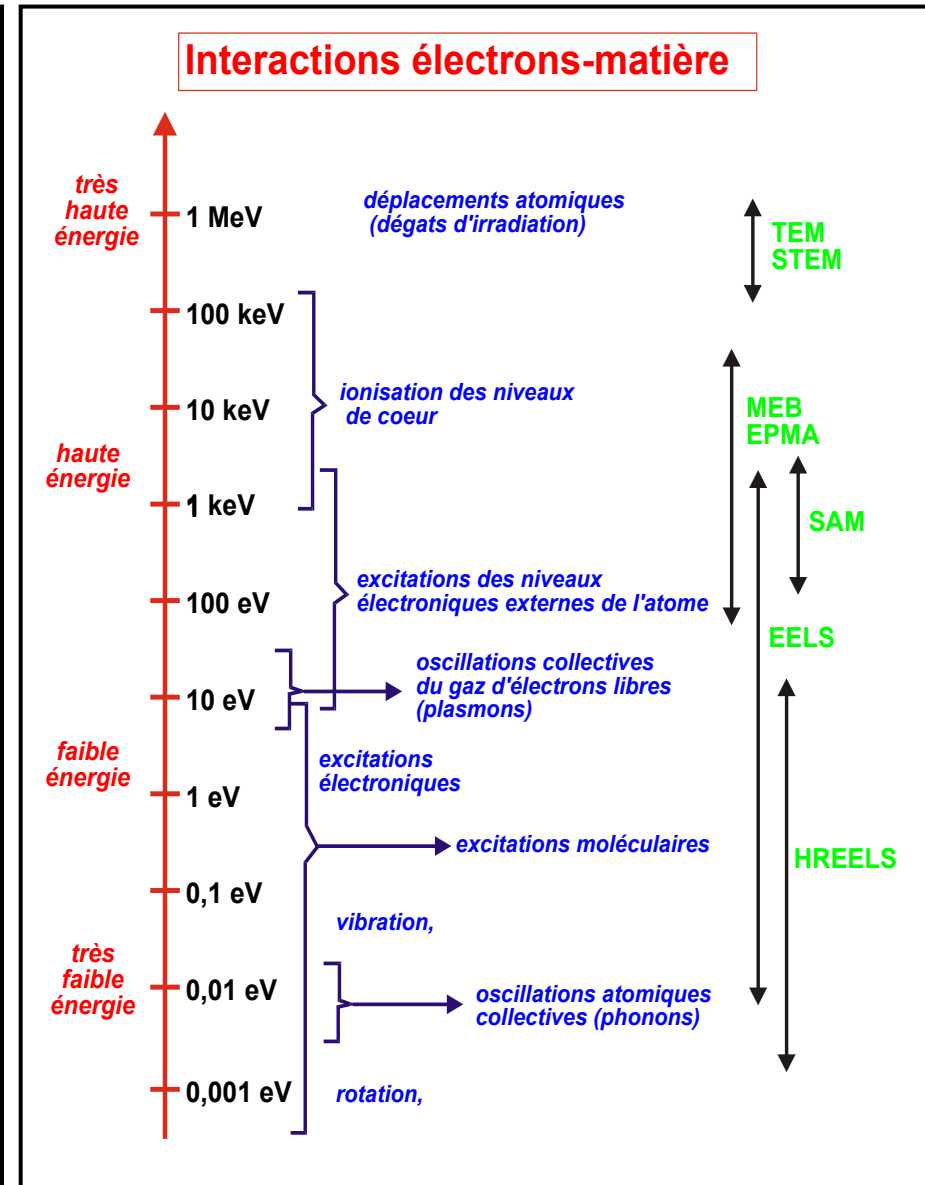
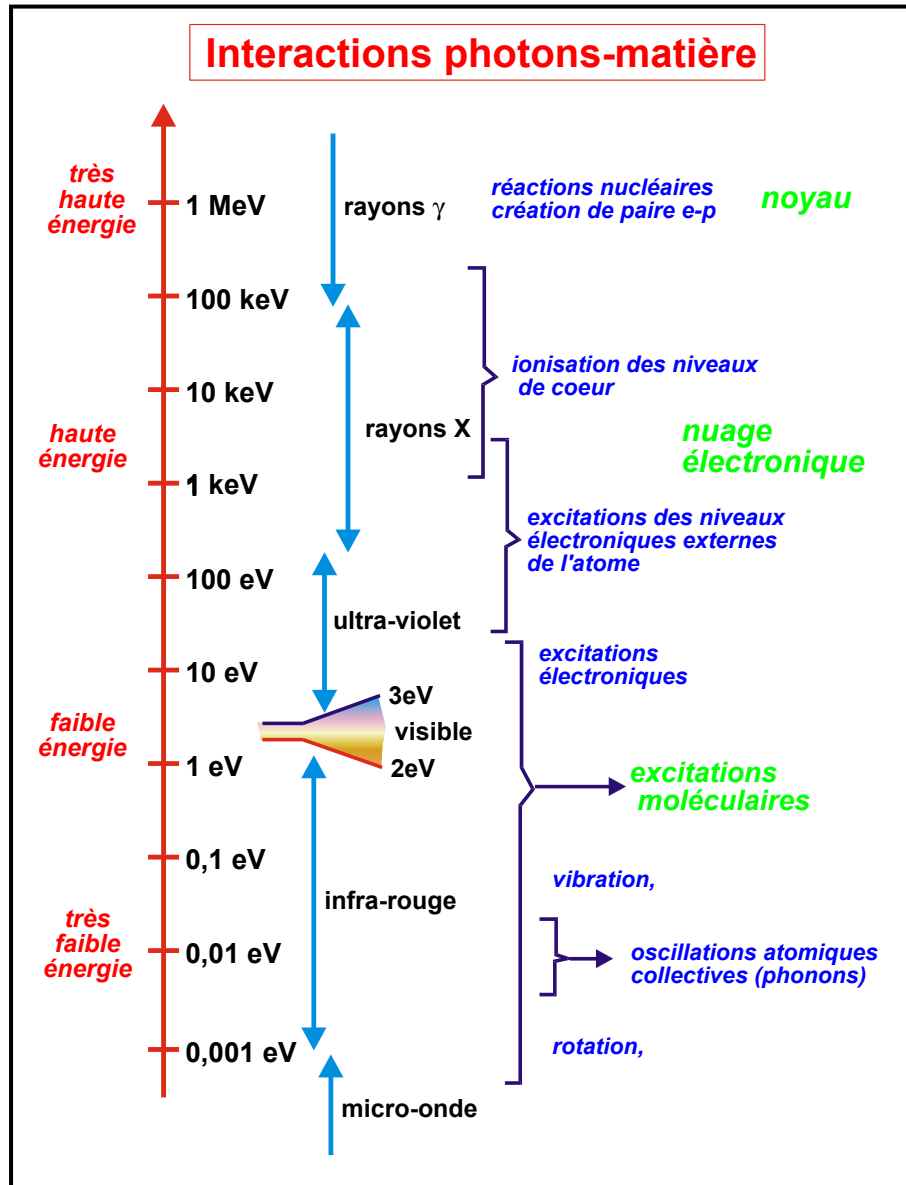
Libre parcours moyen = distance moyenne
entre deux interactions

$$\Lambda = \frac{1}{N \sum \sigma_i} \quad L$$

 Nombre de centres diffusants (L^{-3})

Une interaction i  un libre parcours moyen L_i

Comparaison des interactions



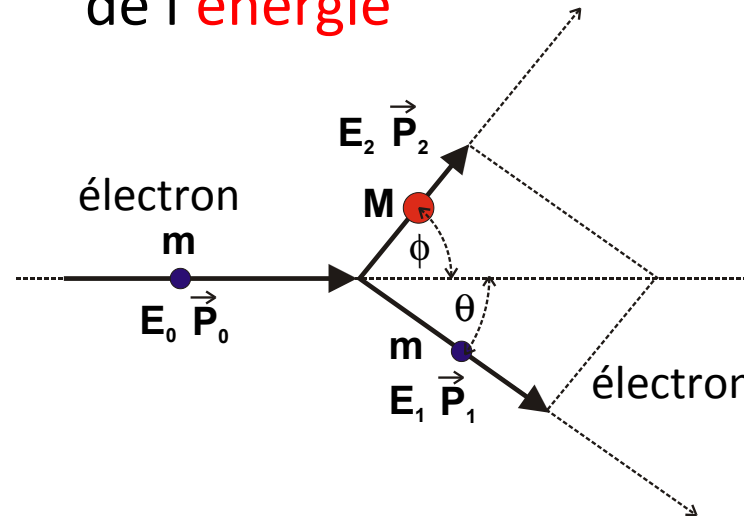
Interaction élastique ou inélastique?

Particule: énergie cinétique $E = 1/2mv^2$
quantité de mouvement $p = m\vec{v}$

Conservation de la quantité de mouvement
de l'énergie

$$\vec{P}_0 = \vec{P}_1 + \vec{P}_2$$
$$E_0 = E_1 + E_2$$

$E_0 = E_1$
Conservation de
l'énergie cinétique
de l'électron
Choc élastique



$E_0 \neq E_1$ ($E_0 > E_1$)
Non conservation de
l'énergie cinétique
de l'électron
Choc inélastique

Un choc élastique ne modifie pas
la structure électronique de la cible
($E_2 = 0$)

Un choc inélastique modifie
la structure de la cible
($E_2 \neq 0$)

Diffusion élastique

Interaction avec le noyau

Très petite dimension (10^{-12} m)

faible probabilité d'interaction

Charge électrique importante : $+Ze$

forte attraction Coulombienne

forte diffusion de l'électron incident

Masse importante : $M_{\text{atome}} = 1835 A m_{\text{electron}}$

$$\left(\frac{\Delta E}{E_0} \right)_{\text{MAX}} = 4 \frac{mM}{(m+M)^2} \approx 4 \frac{m}{M} \qquad \Delta E = \frac{1}{1835A} E_0 \cos^2 \varphi$$

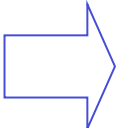
avec m/M variant de $5 \cdot 10^{-4}$ (H) à $2 \cdot 10^{-6}$ (U)

le transfert d'énergie est très faible

on peut négliger la variation d'énergie cinétique

Section efficace de diffusion élastique de Rutherford (avec la correction de Wentzel)

$$\sigma_e(\theta) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{Ze^2}{4E} \right]^2 \frac{1}{\left[\sin^2 \frac{\theta}{2} + \alpha_e \right]^2} \quad \text{avec} \quad \alpha_e = 3,210^{-3} \frac{Z^{2/3}}{E}$$


 section efficace de diffusion totale

$$\sigma_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{Ze^2}{4E} \right]^2 \frac{\pi}{\alpha_e(1 + \alpha_e)}$$

Pertes d'énergie de l'électron primaire négligeables

Attention : si cette perte peut être négligeable pour l'électron elle ne l'est pas forcément pour l'atome heurté !

$$E_0 = 10 \text{ keV} \quad \Delta E_{\text{Max}}(\text{C}) = 0,45 \text{ eV}, \quad \Delta E_{\text{Max}}(\text{Fe}) = 0,1 \text{ eV}$$


$$E_0 = 100 \text{ keV} \quad \Delta E_{\text{Max}}(\text{C}) = 4,5 \text{ eV}, \quad \Delta E_{\text{Max}}(\text{Fe}) = 1 \text{ eV}$$

$$E_0 = 1000 \text{ keV} \quad \Delta E_{\text{Max}}(\text{C}) = 45 \text{ eV}, \quad \Delta E_{\text{Max}}(\text{Fe}) = 10 \text{ eV}$$

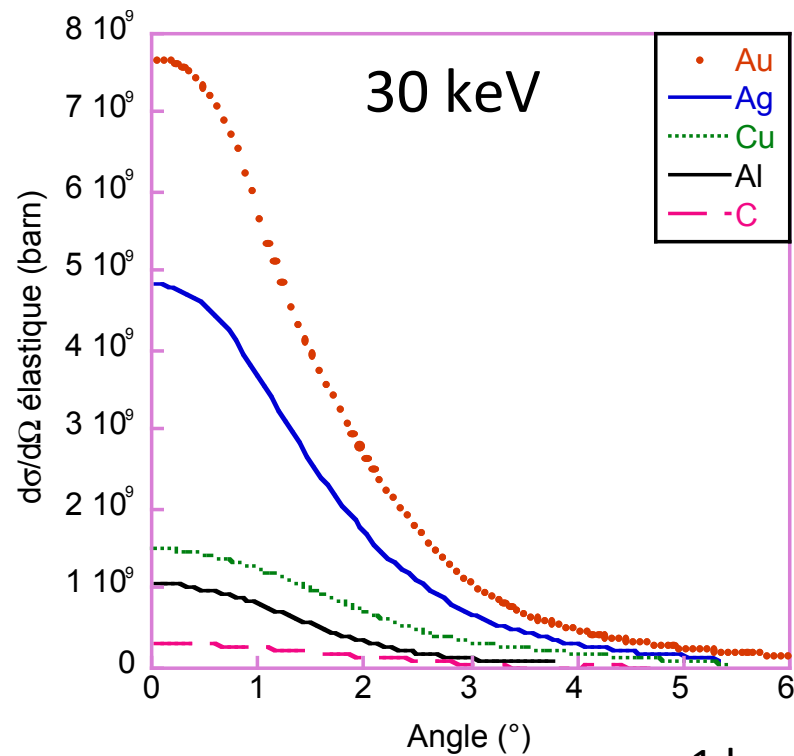
*déplacements
atomiques*

Diffusion élastique

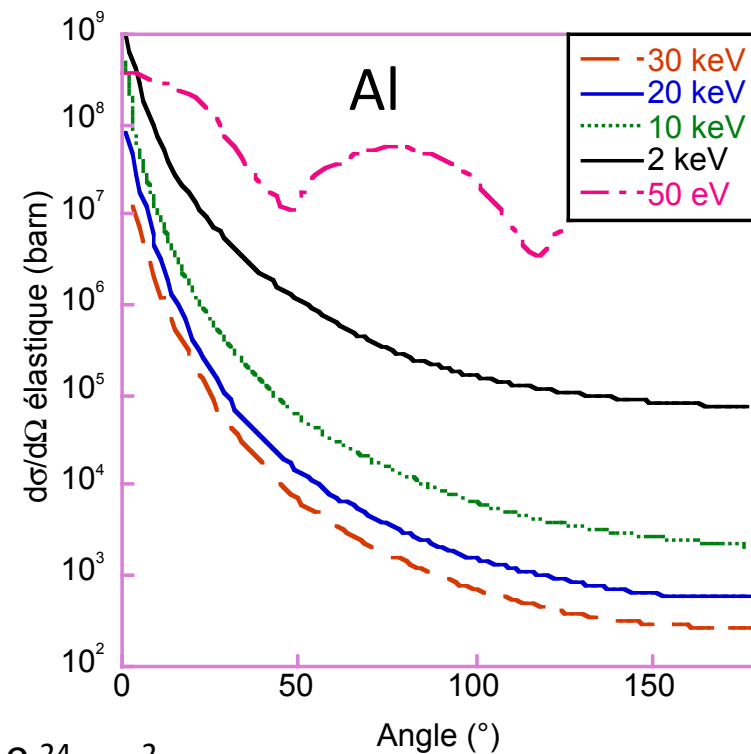
Interaction électron - noyau

$m_{\text{électron}}/m_{\text{noyau}} \ll 1$  très peu d'échange d'énergie
< 1eV

$$s_{\text{el}} \propto Z^2 \text{ et } E_0^{-2}$$



1 barn = 10⁻²⁴ cm²



Rétrodiffusion

Diffusion élastique



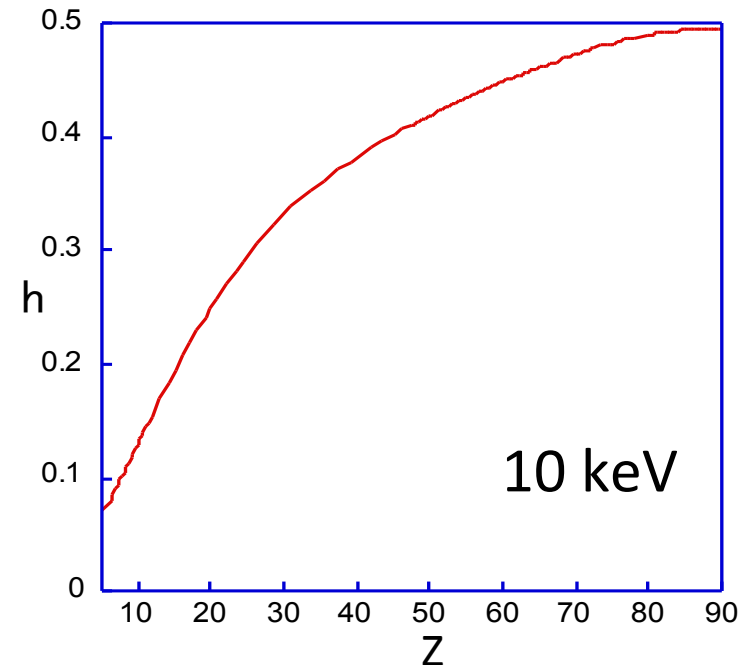
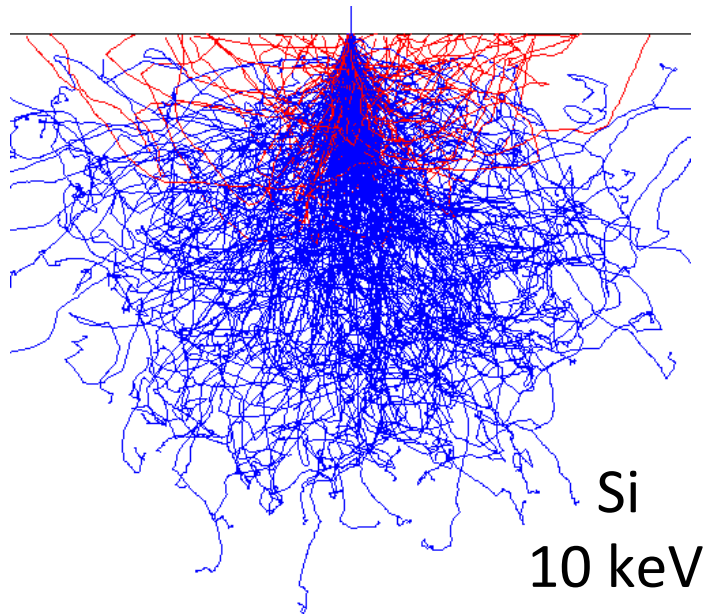
Déflexion angulaire

Plusieurs déflexions angulaires



Électron

- retourne en arrière
- quitte la cible



$h = \text{nombre d'e- rétrodiffusés} / \text{nombre d'e- incidents}$

Diffusion inélastique

Diffusion **électron - noyau**

Donne lieu au rayonnement de freinage

Bremsstrahlung

Cf. fin du cours

Diffusion inélastique

Diffusion **électron - électron**

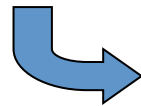
Masses identiques $M=m$

$$\Delta E = 4E_0 \frac{mM}{(m+M)^2} \cos^2 \phi = E_0 \cos^2 \phi$$

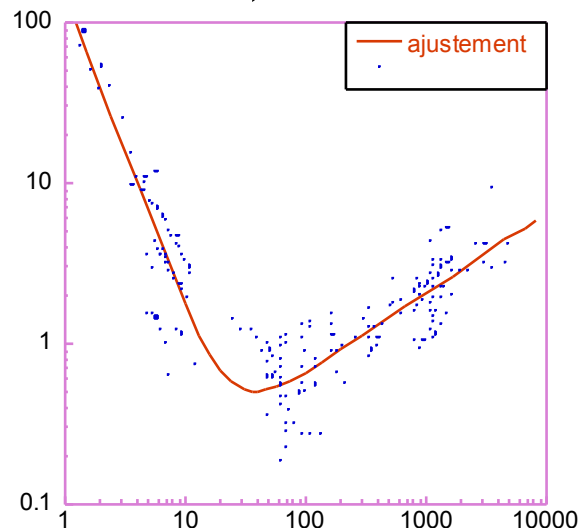
→ transfert d'énergie non négligeable

- **Peu de déviation** de la particule incidente
- **Perte d'énergie** ← ralentissement des électrons

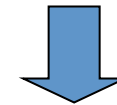
$$S_{inel} \propto \ln(U)/U \quad \longleftarrow \text{Surtension} = E_0/E_{nlj}$$



Chocs avec faible perte d'énergie probables

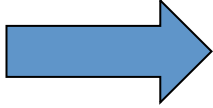


Pour des électrons
[qq 100 eV - qq 10 keV]

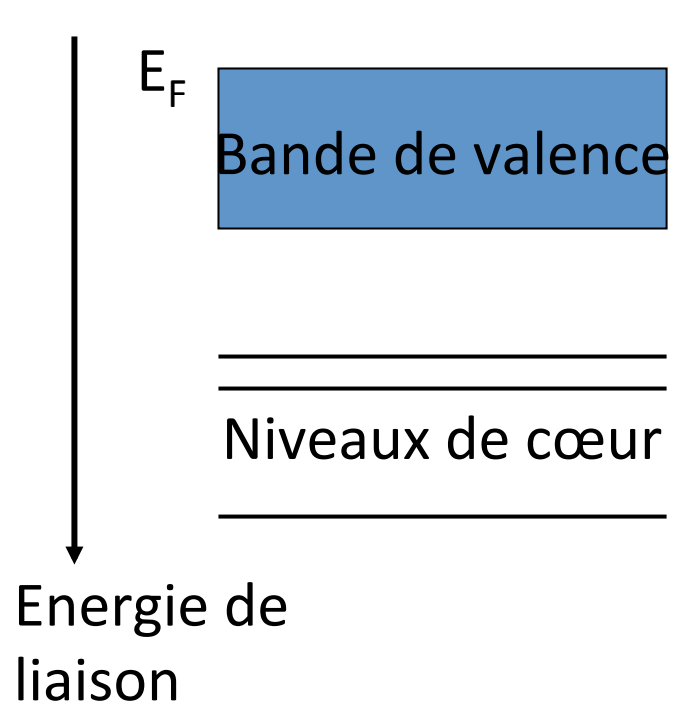


L_{inel} [1 nm - 10 nm]

Plasmon

Solide  « Mise en commun »
électrons les moins liés
bande de valence

Plasmon = **excitation collective** des électrons de valence



Énergie [2 - 20 eV] selon les éléments



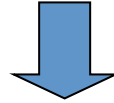
Faible perte d'énergie
Perte d'énergie caractéristique



Très probable

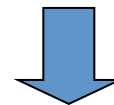
Excitation individuelle des électrons de valence

Éjection d'un électron de valence



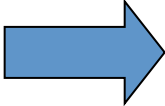
Electrons secondaires « vrais »

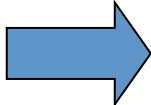
Perte d'énergie continue
Electrons secondaires [0 - 50 eV]
Très probable
Distribution spatiale isotrope

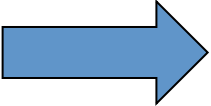


Imagerie
dans le
MEB

Excitation électrons de cœur

Éjection d'un électron de cœur  Perte d'énergie =
Energie de liaison e^- de cœur

Perte d'énergie grande [20 eV - qq 10 keV]  **Peu probable**

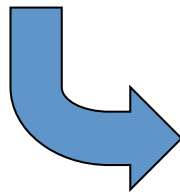
Etat ionisé = état instable  Retour à l'état fondamental

Libération d'énergie  Transitions électroniques

Emission

• **électron Auger**

• **photon X caractéristique**



Section efficace d'ionisation

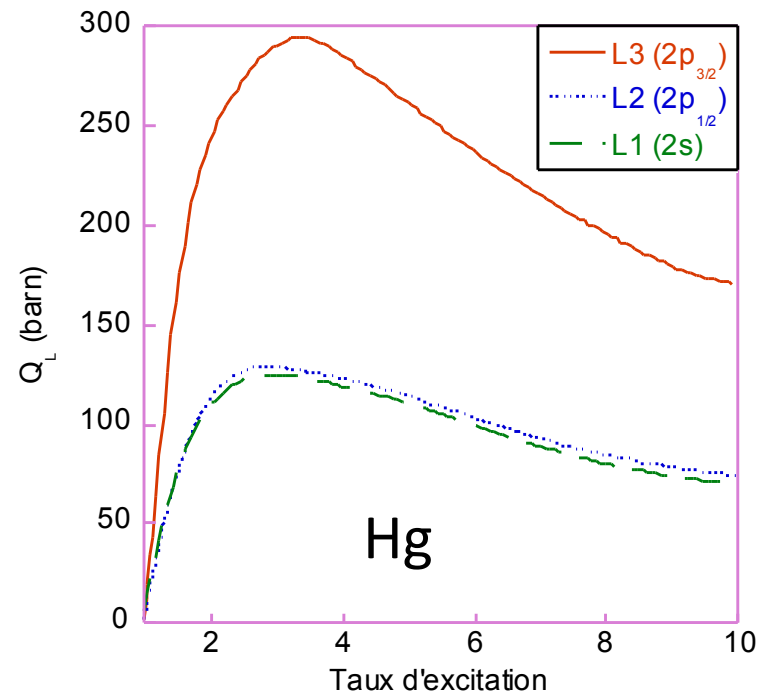
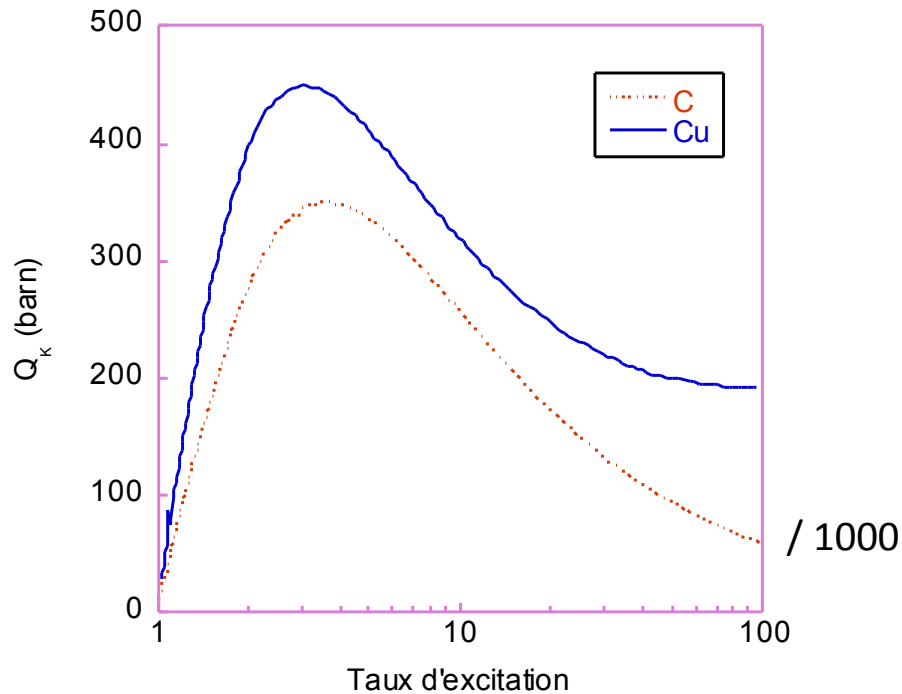
Notation : Q

Maximum à 3-4 fois énergie de liaison e^- de cœur

énergie de liaison grande

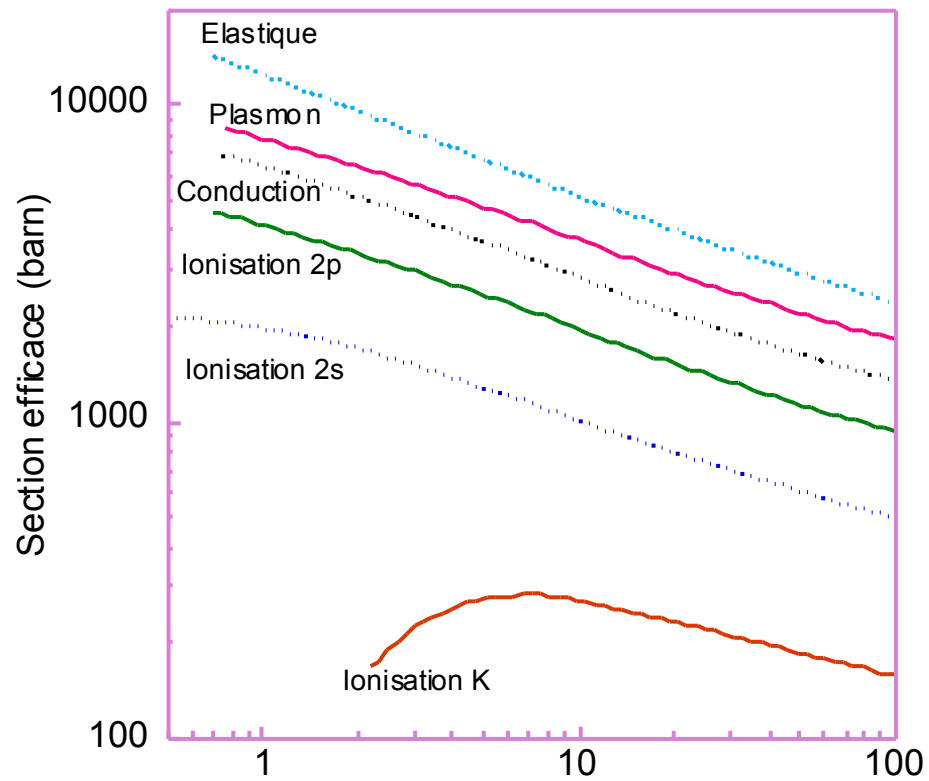


Q petit

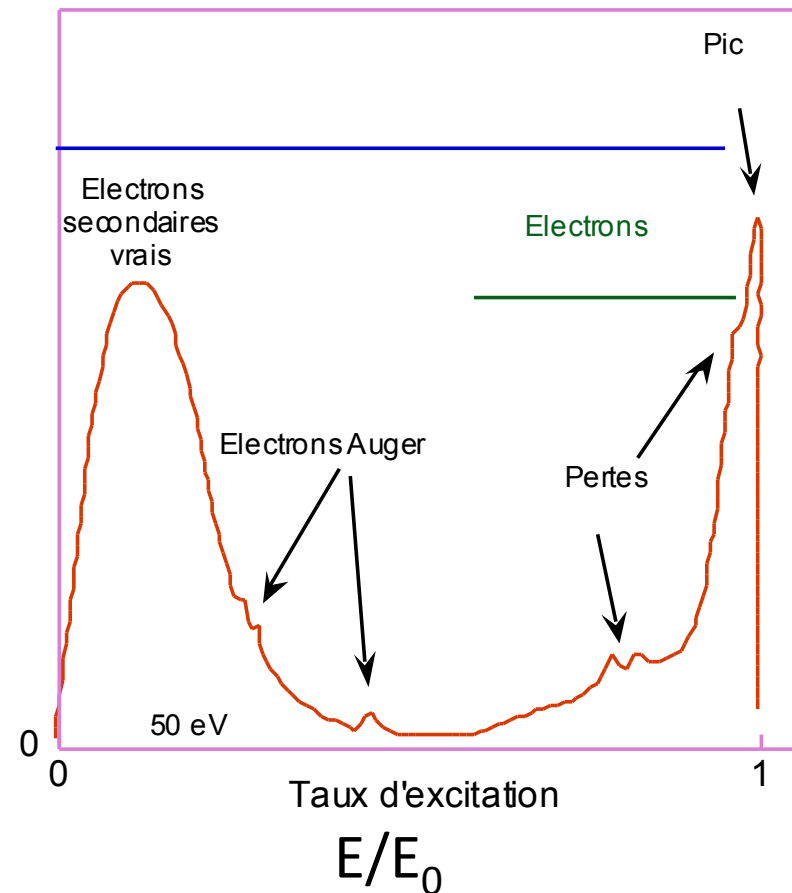


Comparaisons

Sections efficaces intensités



Distribution en énergie électrons secondaires



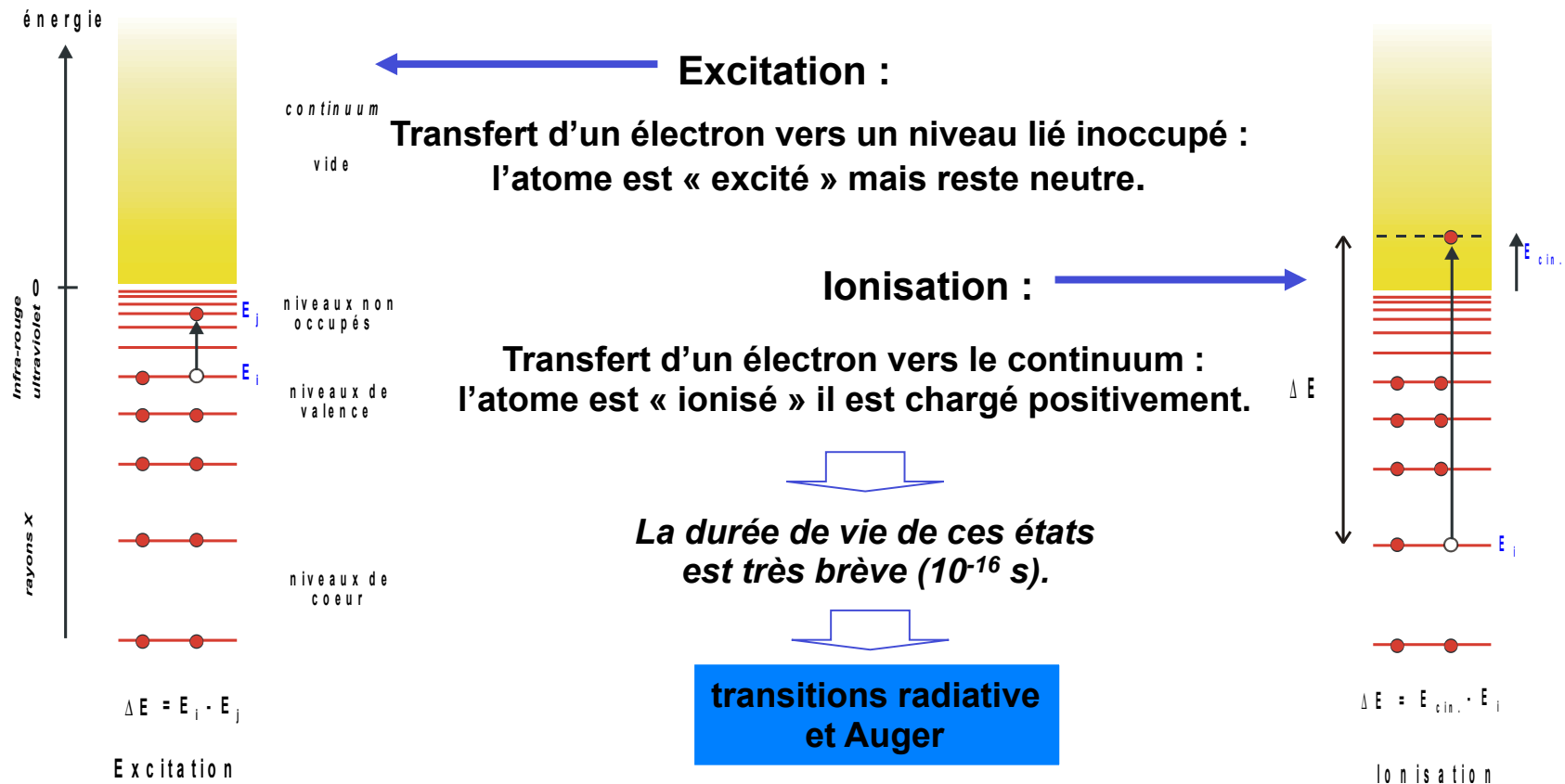
Choc inélastique: en résumé

électron primaire

cible

- perte progressive d'énergie
- ralentissement
- trajectoire finie

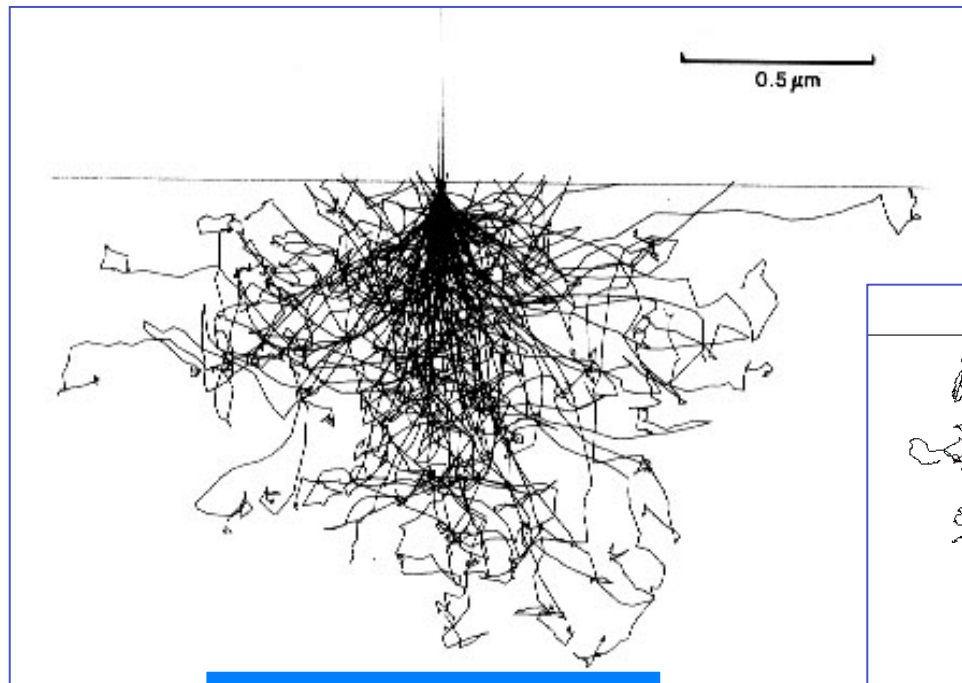
- échauffement ($\sum E < eV$)
- excitation (phonon, plasmon...) ($\sum E \sim 10eV$)
- ionisation ($\sum E$ de 100eV à 100 keV)
 - émission caractéristique X
 - émission électronique secondaire



En pratique ...

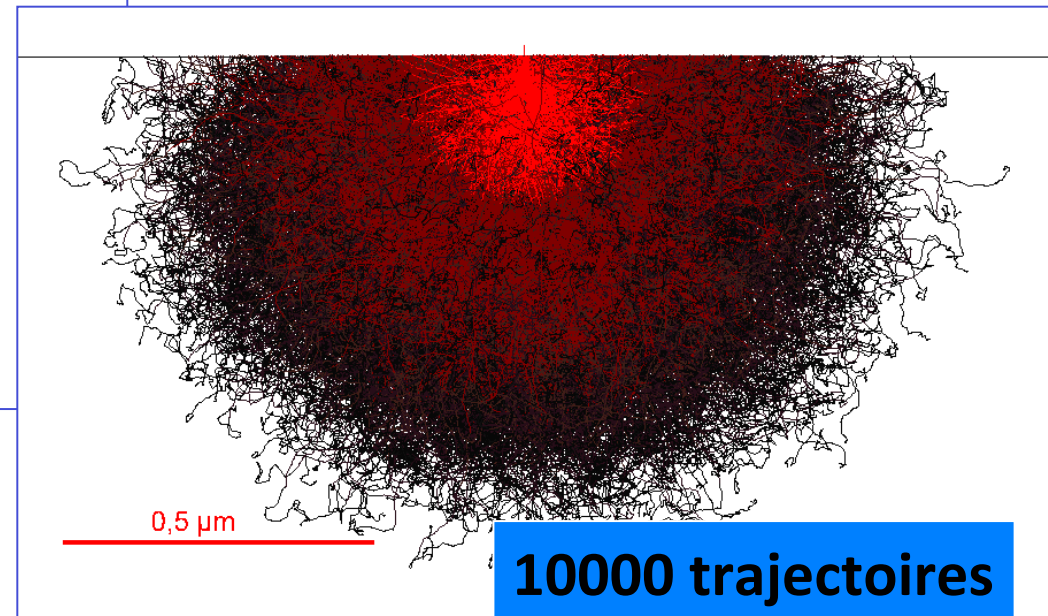
Les trajectoires électroniques ont une longueur finie
sont aléatoires
sont très « perturbées »

**Visualisation
simulation de Monte Carlo**



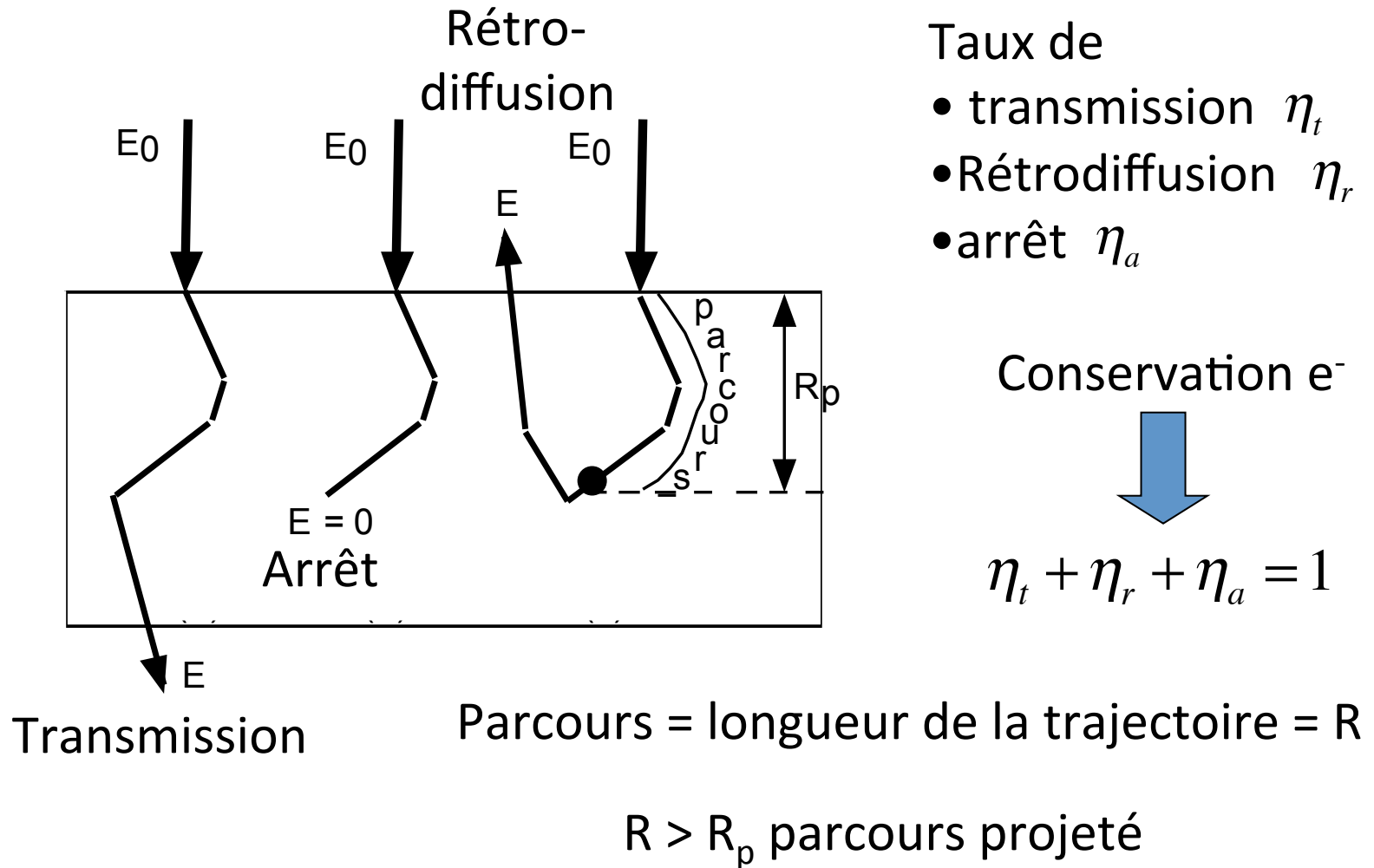
100 trajectoires

Cible de fer (20 keV)



10000 trajectoires

Trajectoire des électrons



Taux de

- transmission η_t
- Rétrodiffusion η_r
- arrêt η_a

Conservation e^-



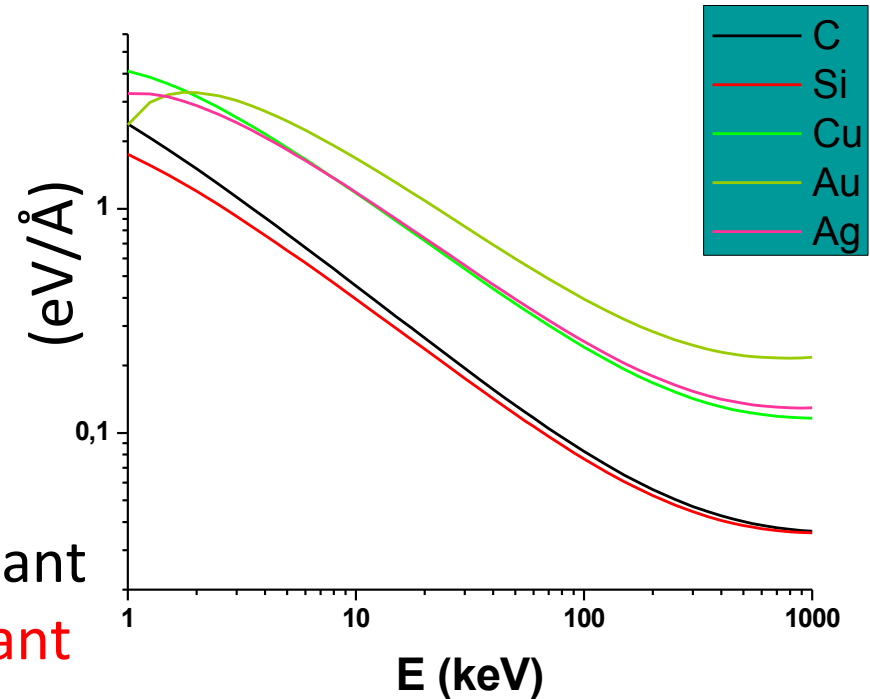
$$\eta_t + \eta_r + \eta_a = 1$$

Ralentissement, parcours

- Parcours R

$$R(E_0) = \int_{E_0}^0 ds = \int_0^{E_0} \frac{dE}{-(dE/ds)}$$

perce d'énergie moyenne



Pratiquement

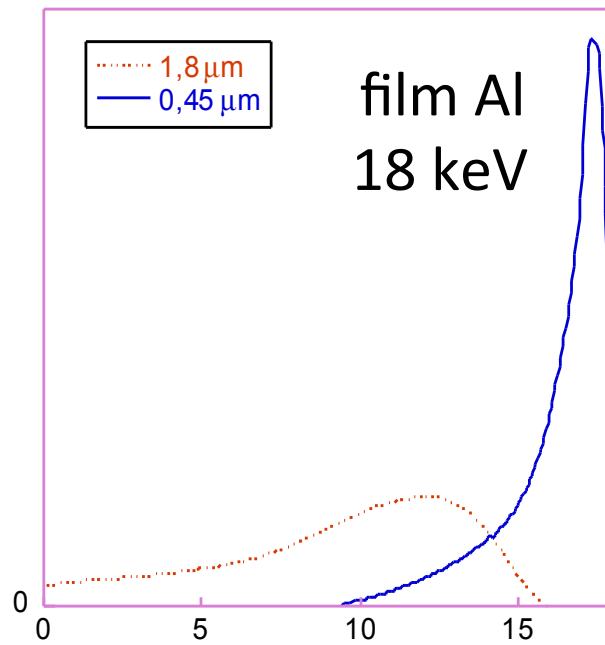
- trajectoire (électron) peu intéressant
- **profondeur (échantillon) intéressant**

- Parcours projeté R_p $R_p = C(Z) E_0^n$ + Formule empirique
C, n : constantes + Monte-Carlo

- Pas de relation entre R et R_p

Distribution en énergie des électrons

transmis

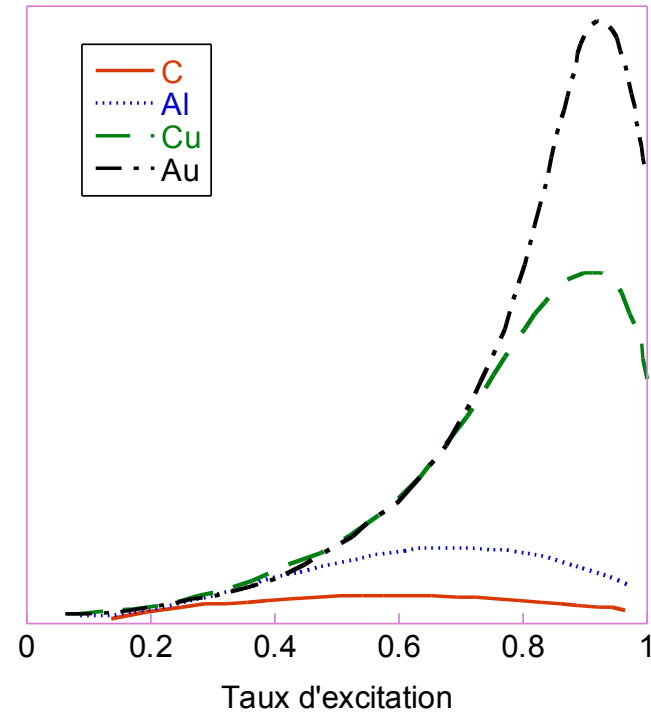


Film mince



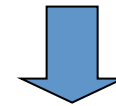
Peu de perte d'énergie

rétrodiffusés



Taux d'excitation

Z élevé

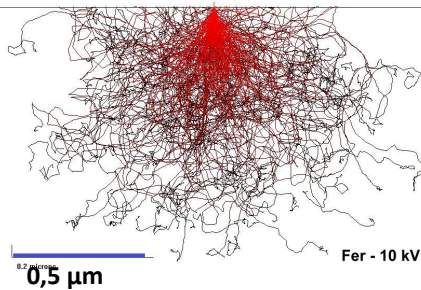


Peu de perte d'énergie

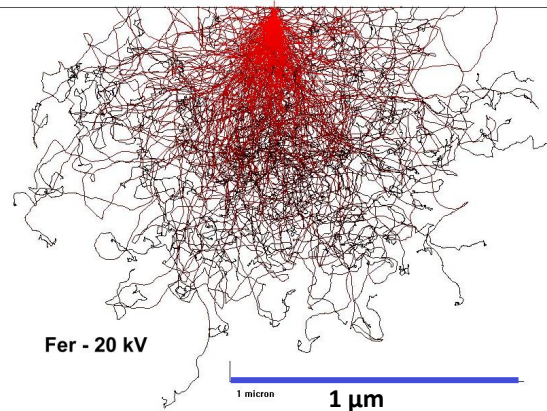
Influence des paramètres fondamentaux

1 – La tension d'accélération

10 kV



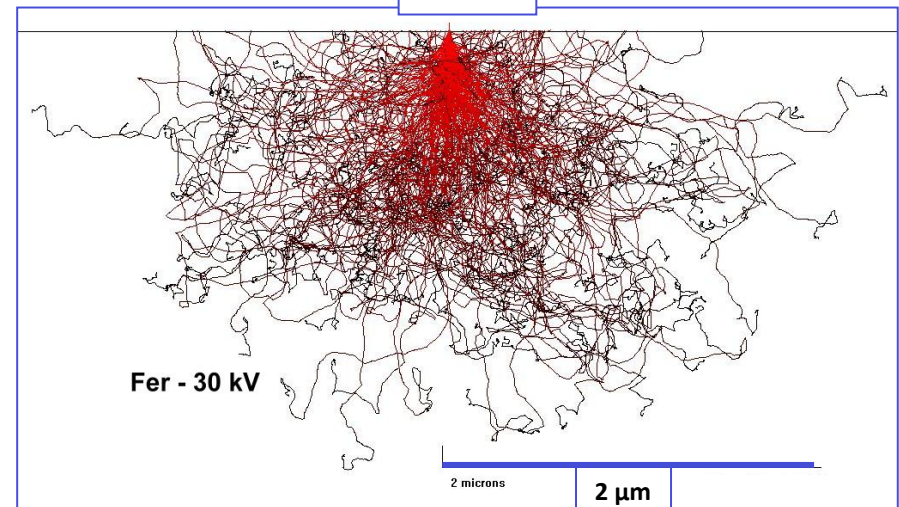
20 kV



Cible de fer

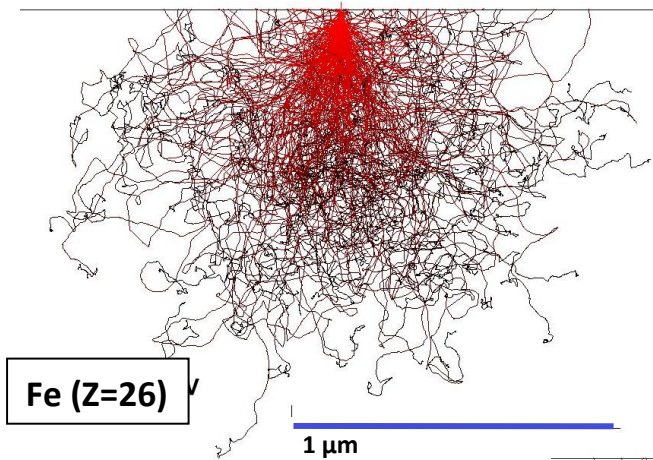
Simulations de Monte Carlo
(250 trajectoires)

30 kV

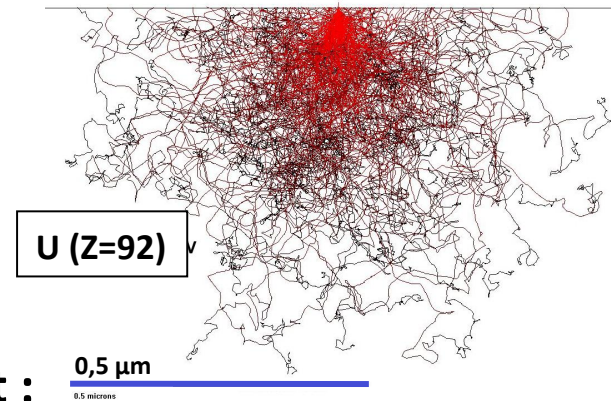
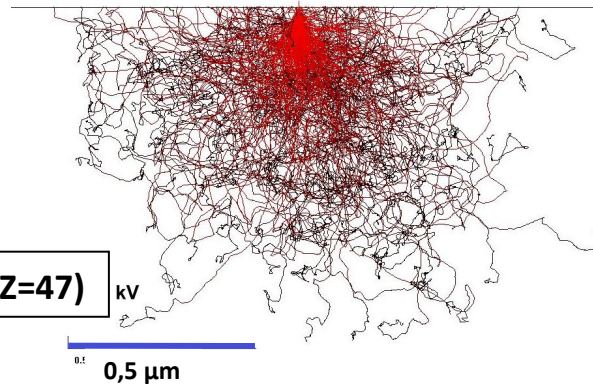
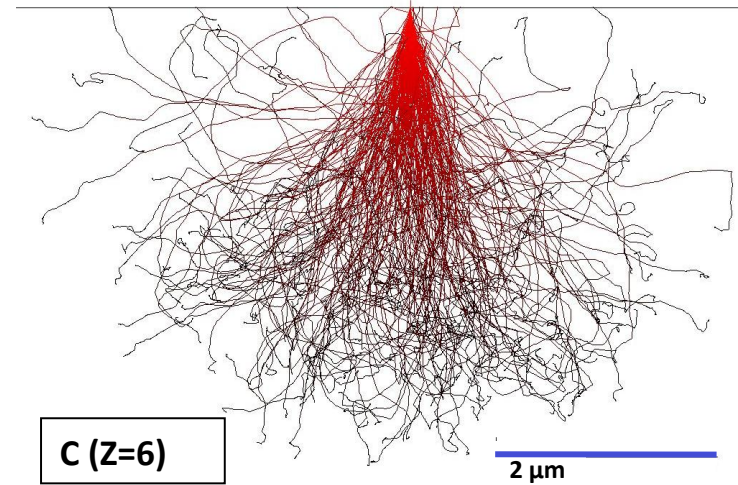


Lorsque la tension d'accélération augmente, la profondeur de pénétration ainsi que la diffusion latérale augmentent fortement (mais la forme générale de l'enveloppe des trajectoires (« poire d'interactions ») ne change pas. **La proportion d'électrons rétrodiffusés n'est pas modifiée.**

2 – La nature de la cible (Z)



20 kV



Quand Z croît :

la pénétration diminue

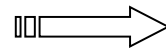
la forme (l'enveloppe) des trajectoires se modifie :

d'une forme de « poire » allongée (Z faible)

elle tend vers une demi-sphère (Z élevé)

- la fraction de trajectoires rétrodiffusées augmente

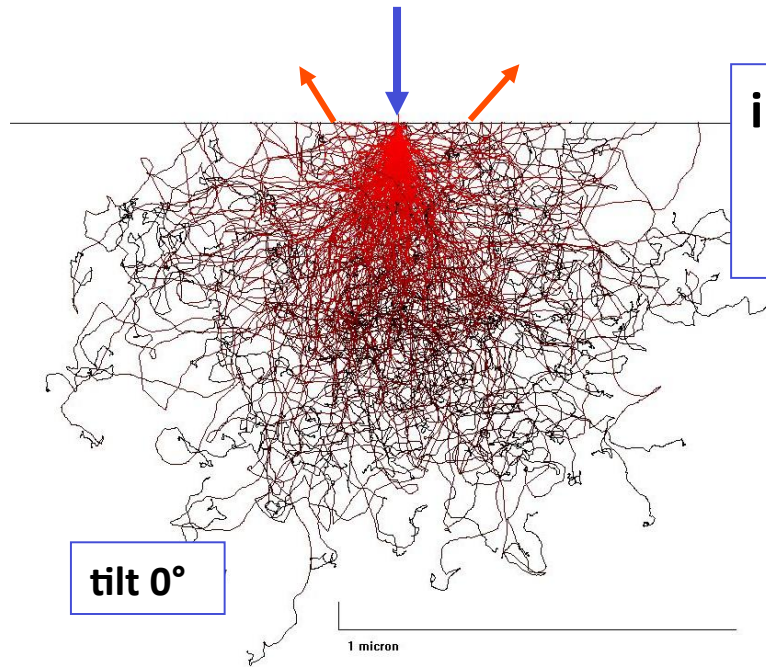
Le coefficient de rétrodiffusion croît



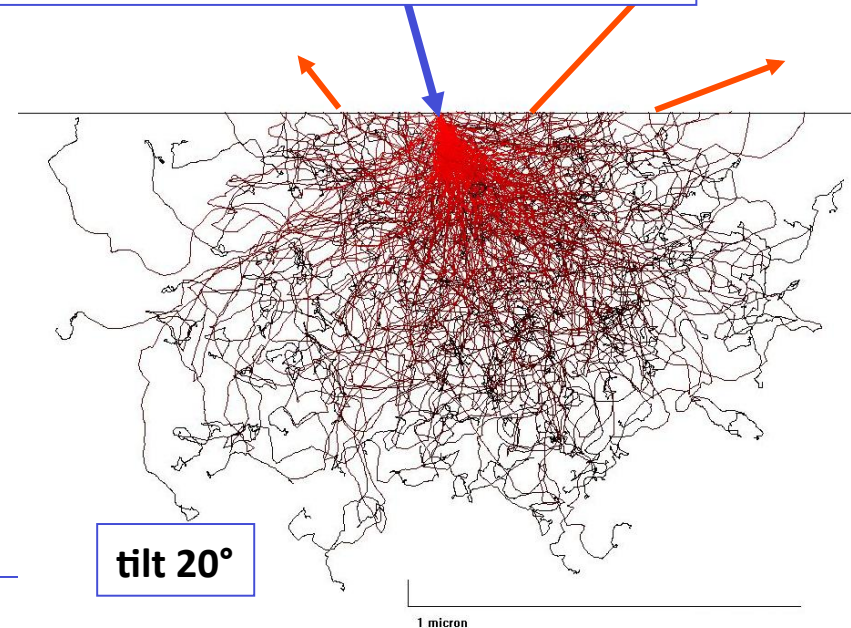
Contraste de nombre atomique

3 - Inclinaison du faisceau (« tilt »)

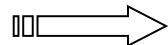
cible de fer 20 kV



incidence normale :
distribution spatiale isotrope
des trajectoires



incidence oblique :
- distribution anisotrope des trajectoires
- augmentation du nombre d'électrons rétrodiffusés
- distribution spatiale anisotrope des électrons rétrodiffusés

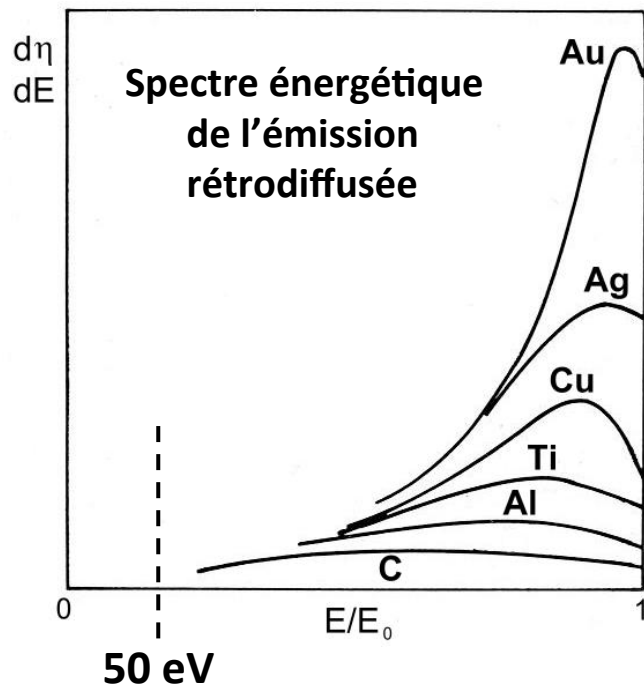


Contraste topographique

L'émission électronique rétrodiffusée

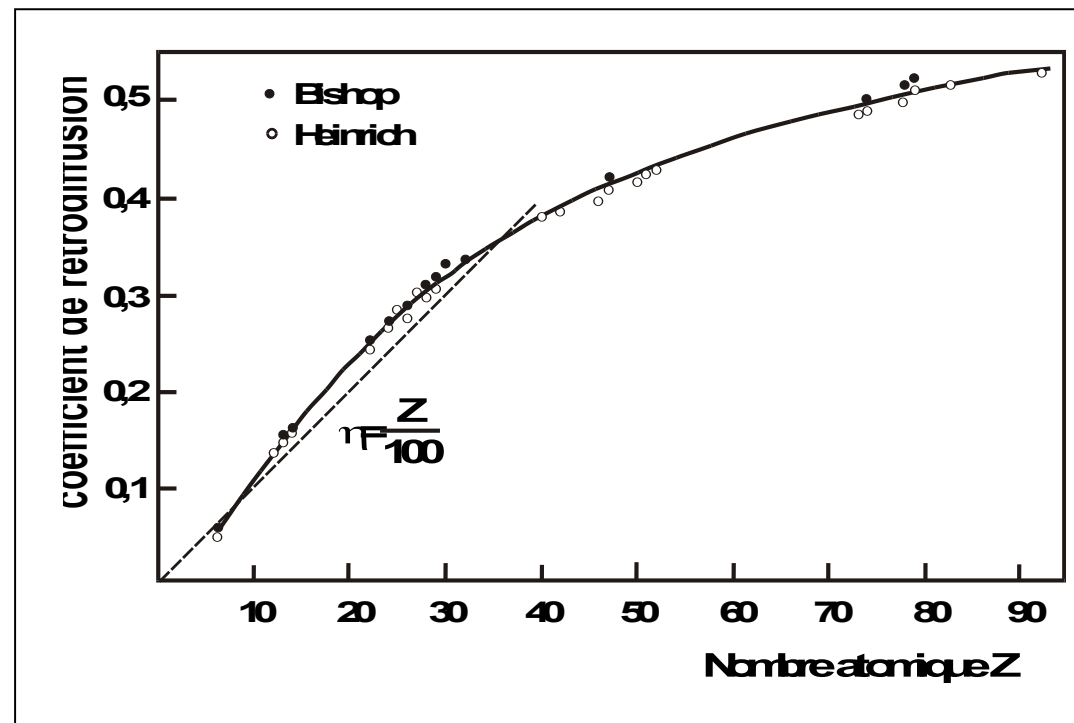
Origine : électrons primaires

principalement de haute énergie



fonction du nombre atomique de la cible

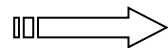
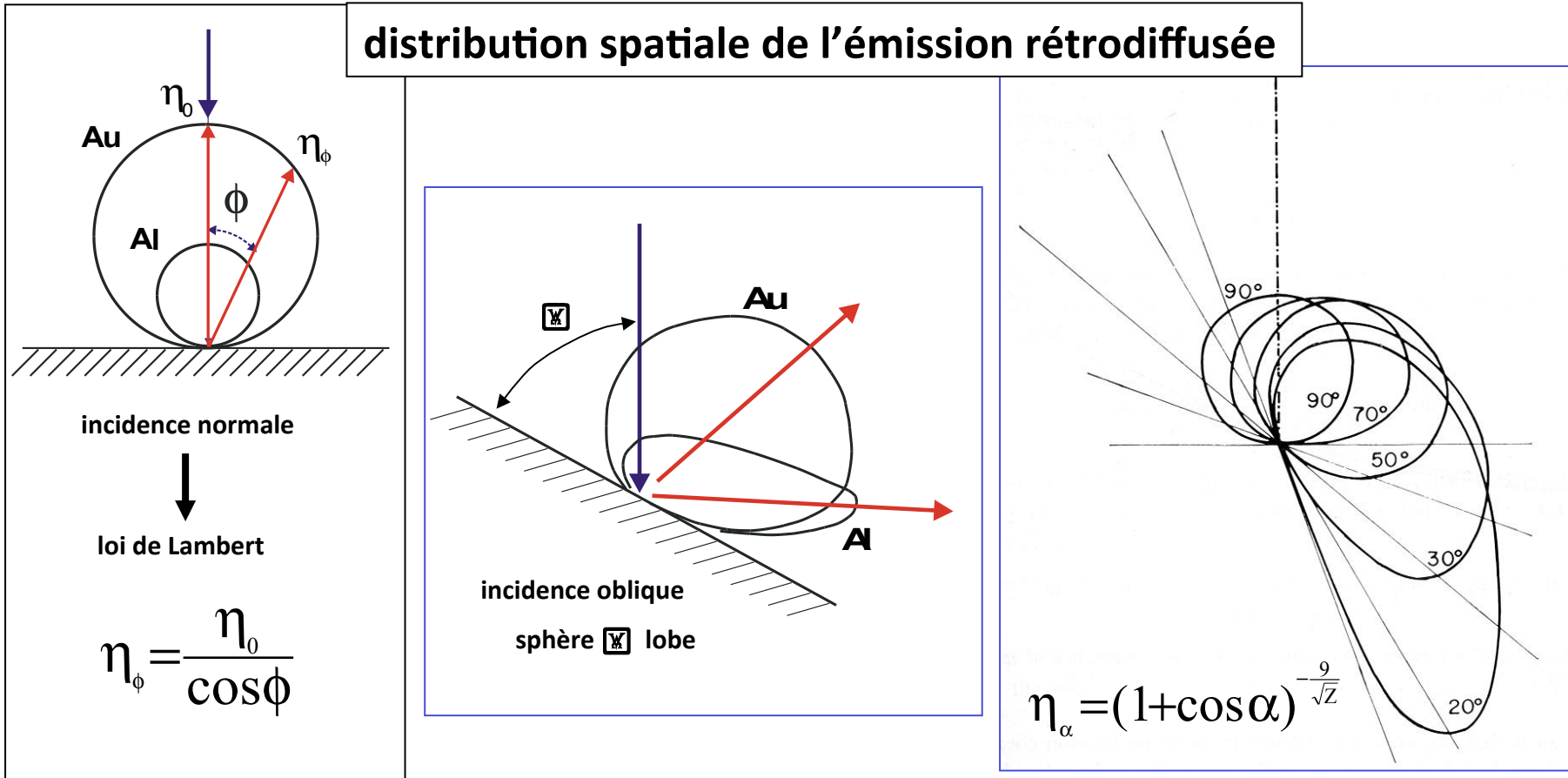
$$\eta = 2^{-\frac{9}{\sqrt{Z}}} \quad (\text{Arnal-Verdier})$$



Contraste de nombre atomique

Influence de l'angle d'incidence du faisceau sur la cible sur l'émission rétrodiffusée

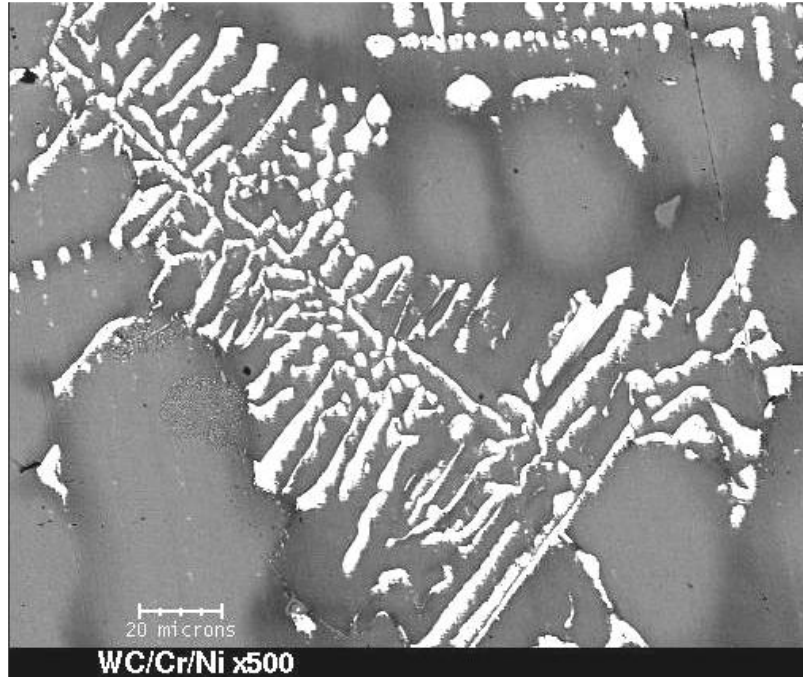
distribution spatiale de l'émission rétrodiffusée



Contraste topographique

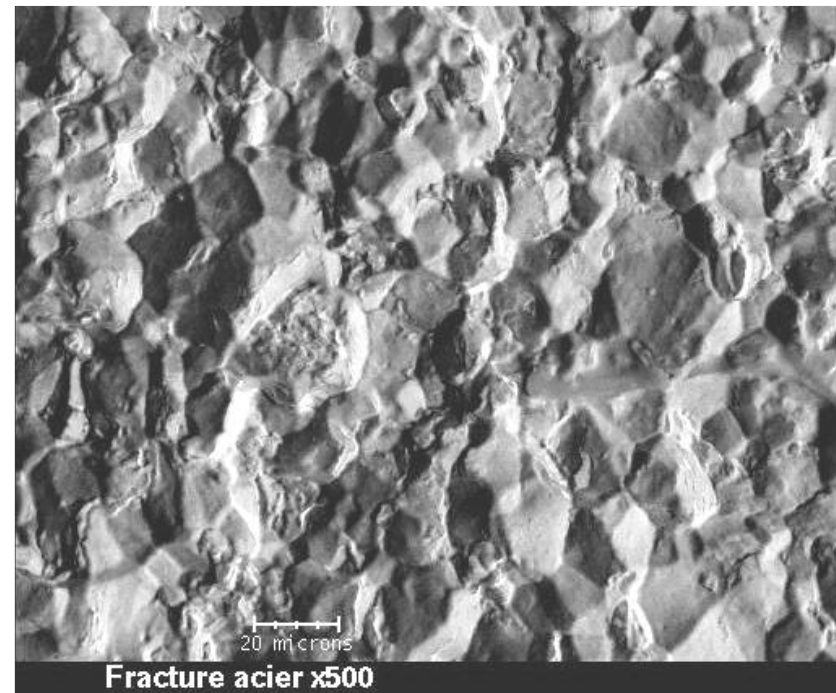
Images en électrons rétrodiffusés

Contraste de nombre atomique



carbures de tungstène dans une matrice Cr-Ni

Contraste topographique

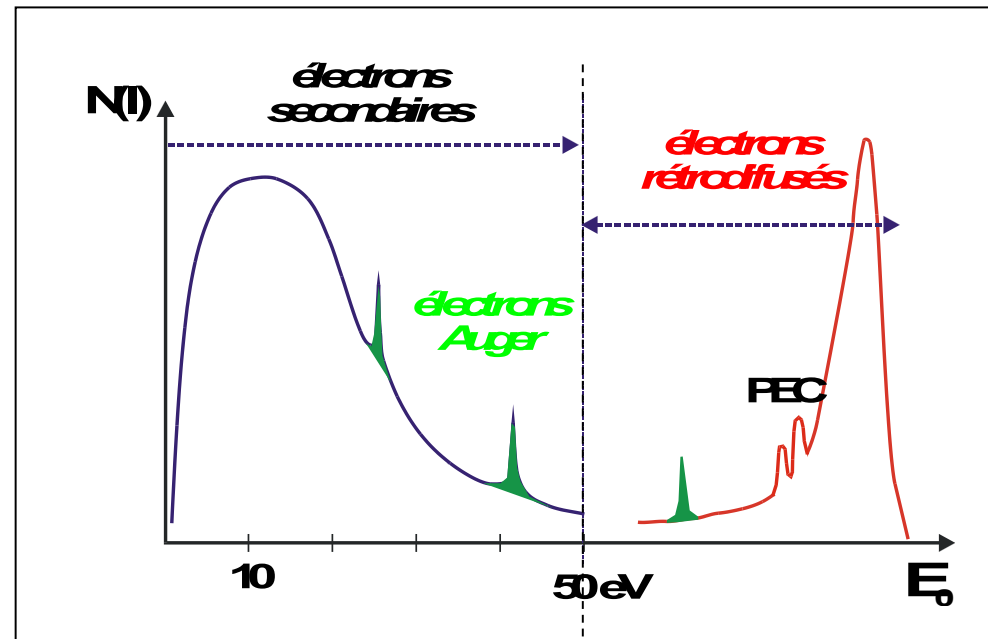
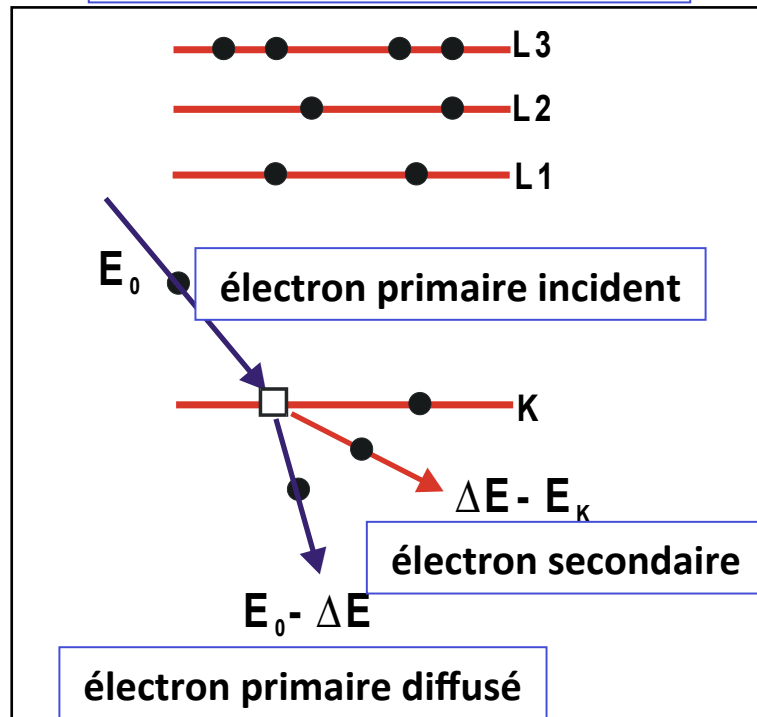


rupture fragile d'un acier

(Documents J. Garden)

L'émission électronique secondaire

électrons issus de la cible
(après ionisation)



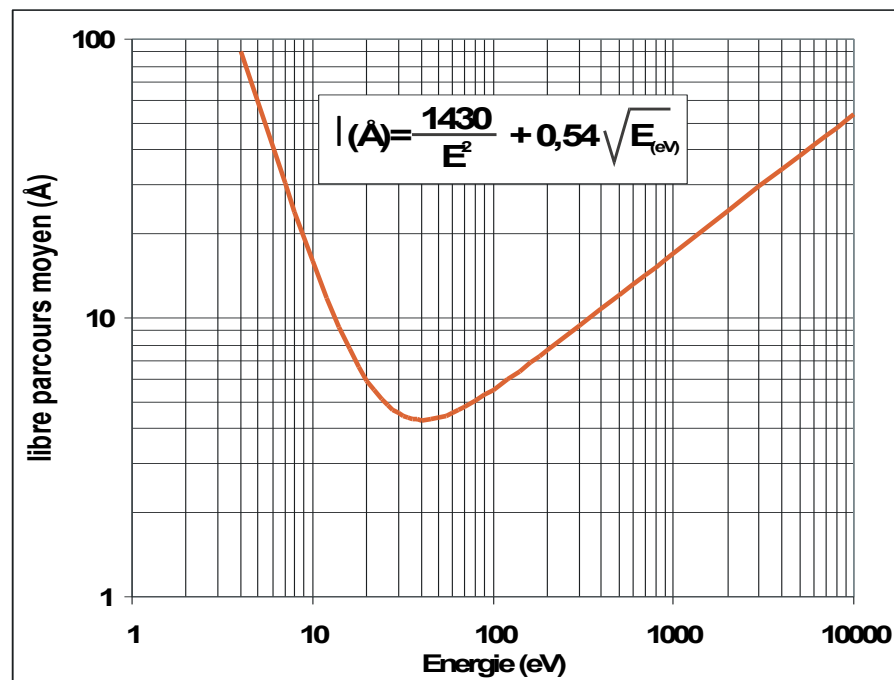
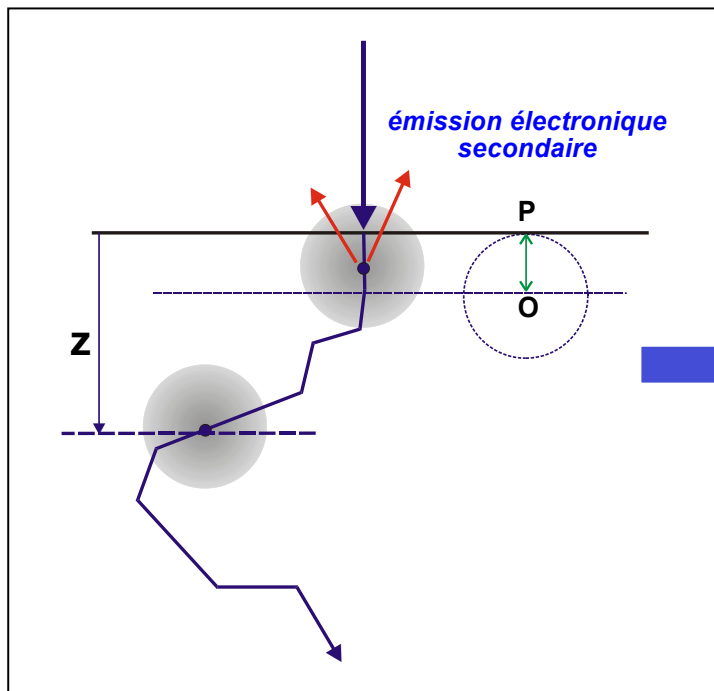
- pas d'influence directe de Z
- forte influence de l'angle d'incidence

50 eV : limite arbitraire
entre secondaires et
rétrodiffusés

A faible énergie

libre parcours moyen faible (quelques nm)

l'électron secondaire perd rapidement toute son énergie sur quelques dizaines de nm...



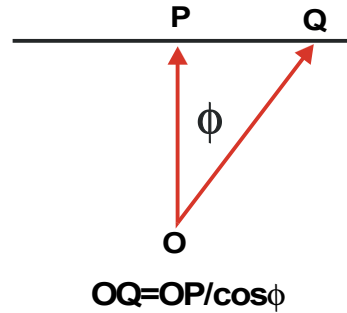
Seuls, les secondaires émis près de la surface auront une probabilité non-nulle de s'échapper et d'être détectés

Emission de surface

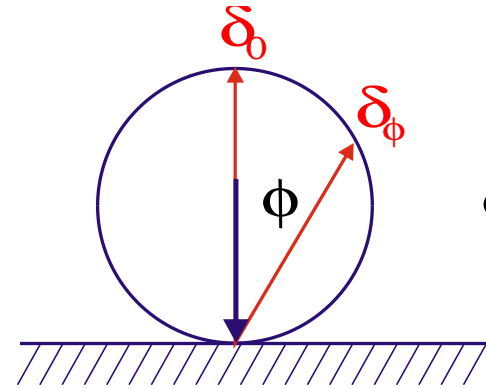
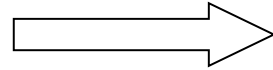
Faible énergie → probabilité d'absorption importante...
→ forte influence des défauts de surface

Influence de l'angle d'incidence

- Incidence normale

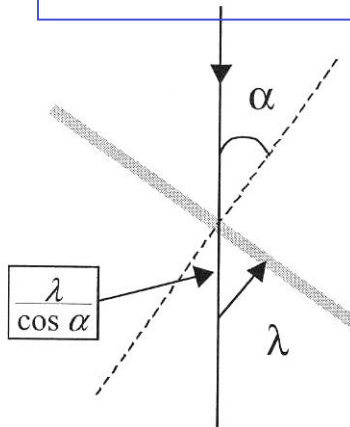


Loi de Lambert



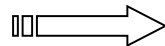
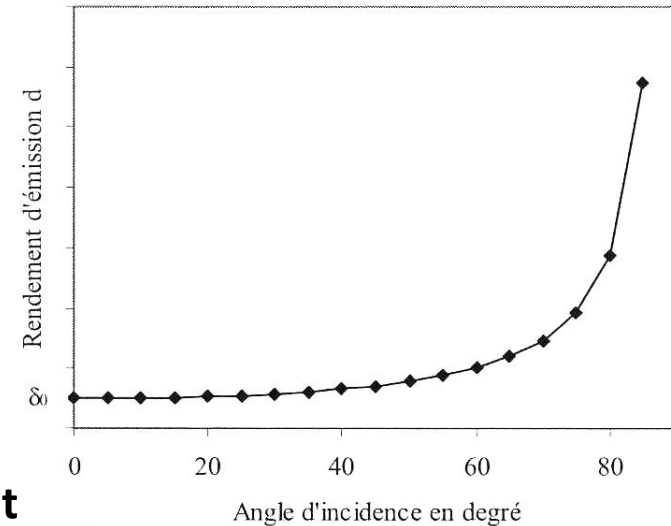
$$\delta_\phi = \frac{\delta_0}{\cos \phi}$$

- Incidence oblique



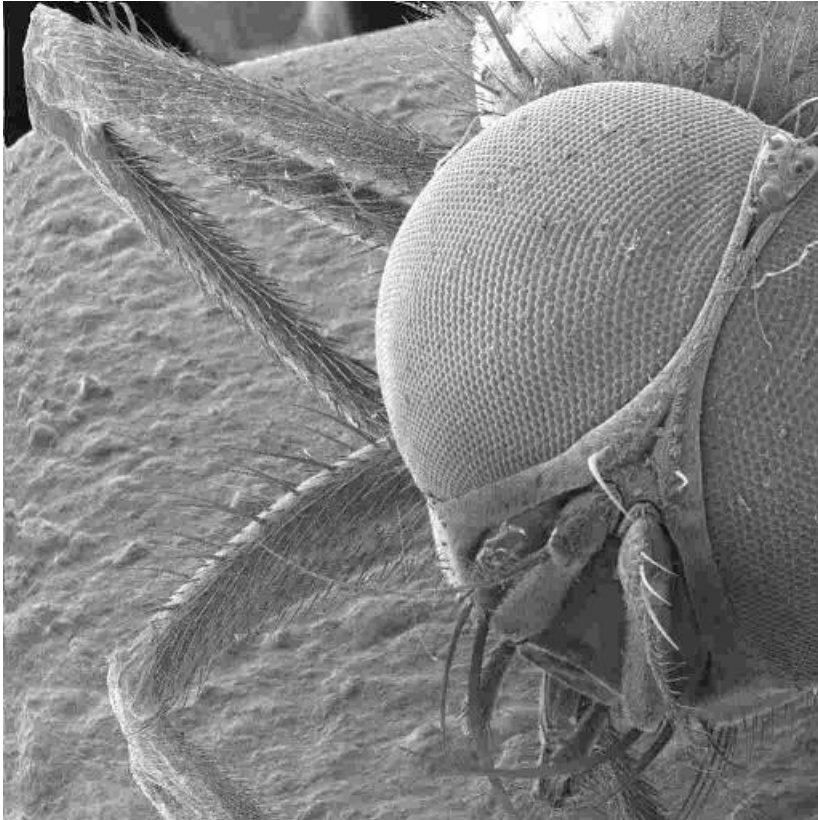
$$d\delta = \delta_0 \operatorname{tg} \alpha \, d\alpha$$

l'émission secondaire augmente fortement avec l'angle d'incidence

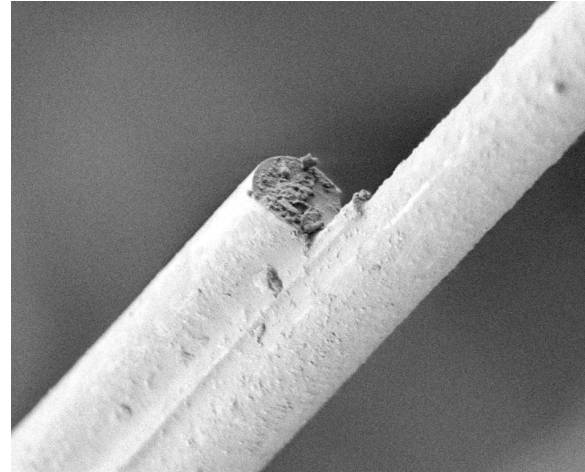


Contraste topographique

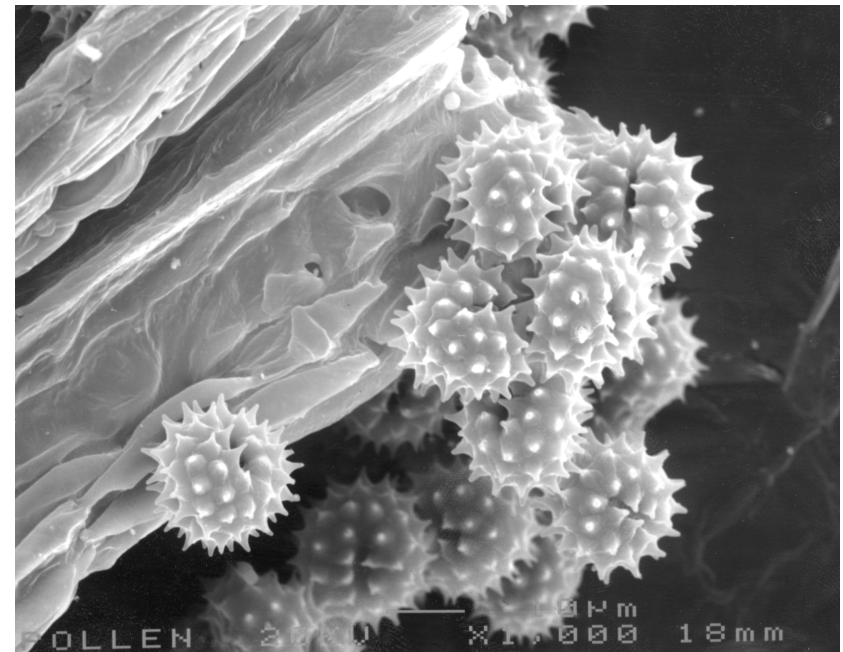
Images en électrons secondaires



tête de mouche



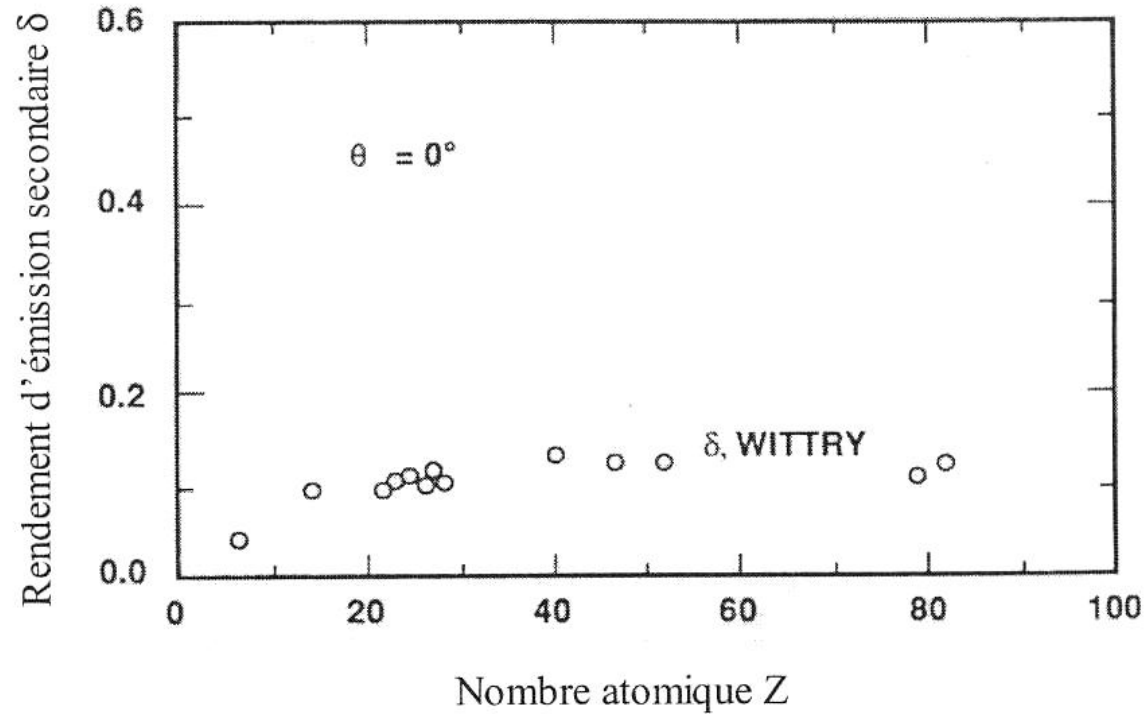
fibres de verre



grains de pollen

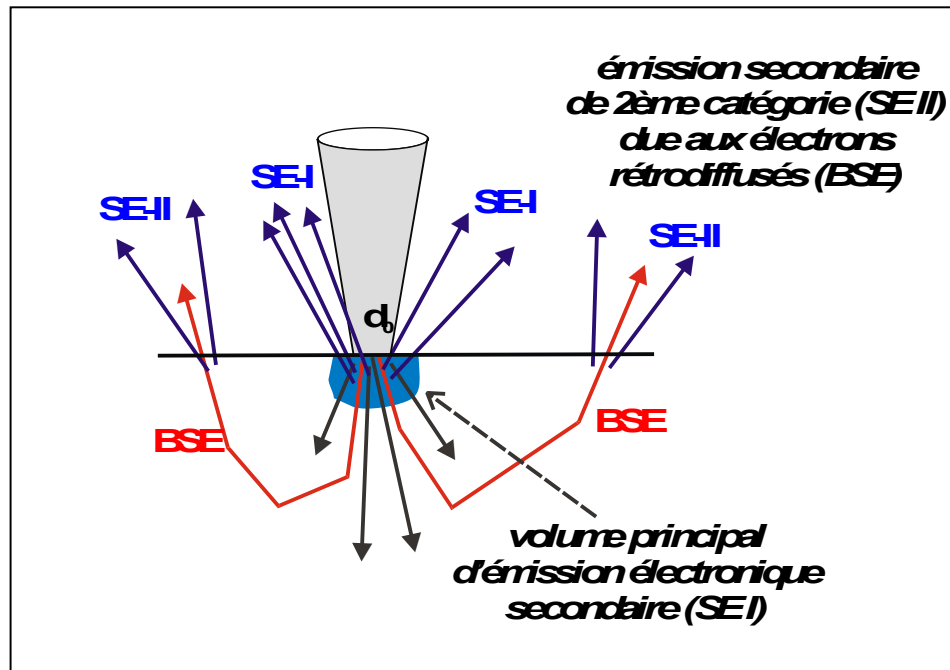
Influence du nombre atomique de la cible

émission secondaire directe (SE-I)
négligeable en première approximation...



Le rendement est de l'ordre de 0,1 (selon les mesures de Wittry)

émission indirecte par les électrons rétrodiffusés... (SE-II)

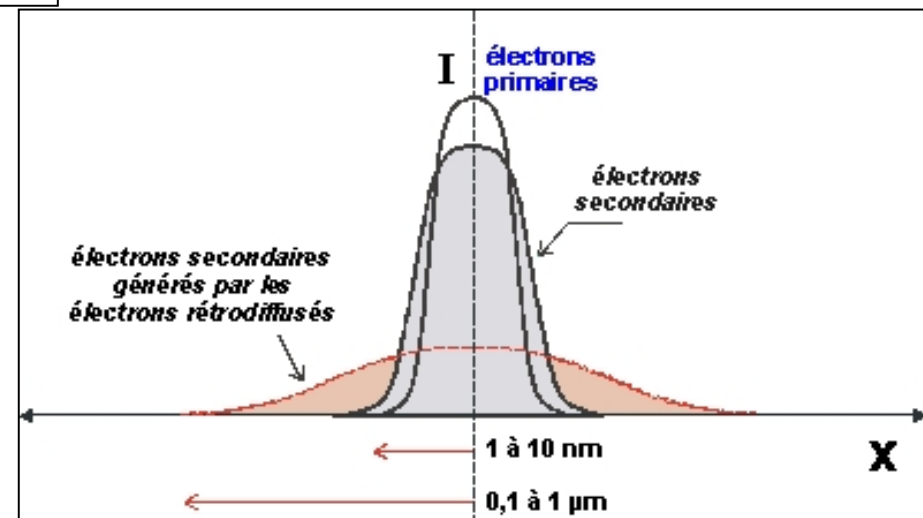


$$\delta = \delta_p (1 + r\eta)$$

\uparrow SE-I \downarrow $2 < r < 4$

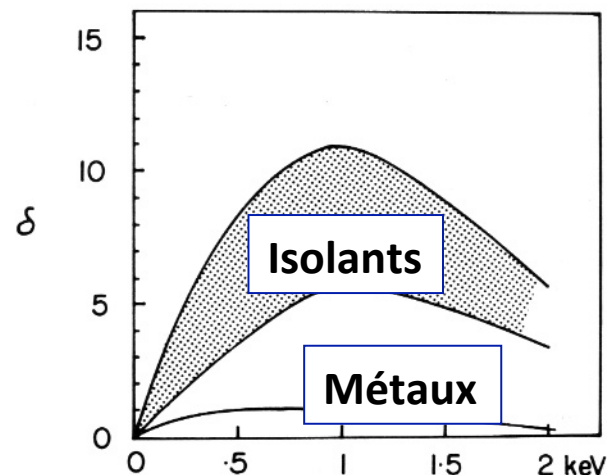
Peut apporter un effet de Z dans une image secondaire en cas de faible relief ou absence de relief...

apporte du bruit dans l'image

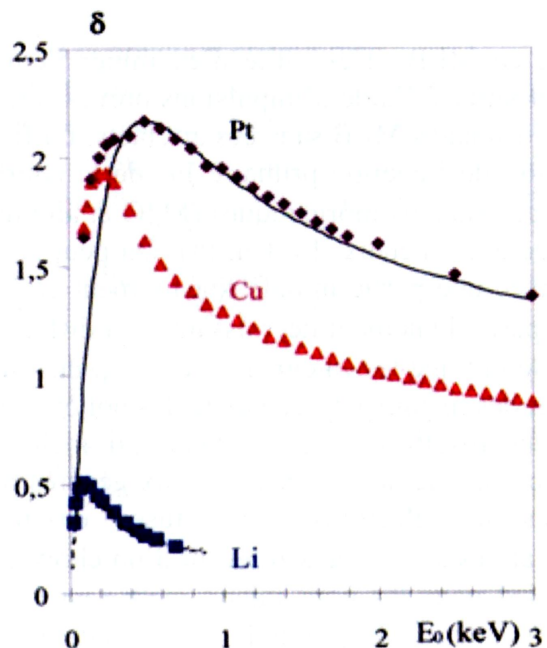


Conducteur ou isolant

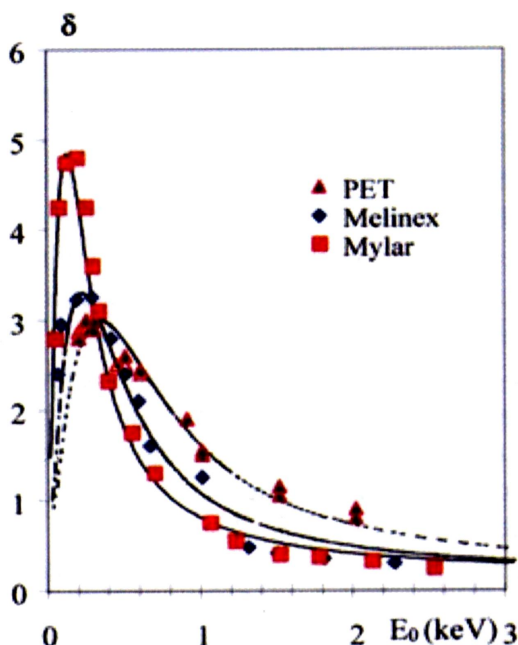
Dans un matériau isolant, le rendement d'émission électronique croît fortement lorsque la tension diminue et peut devenir supérieur à 1 lorsque $E < 1 \text{ keV}$



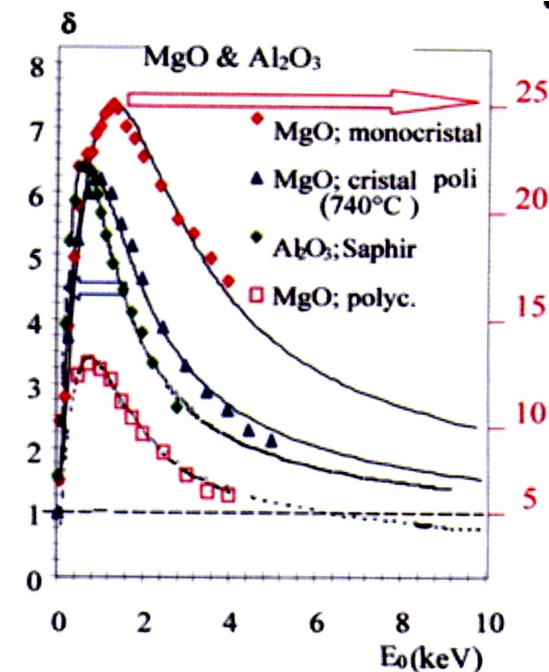
réduction ou suppression des effets de charges à basse tension



Métaux



Polymères

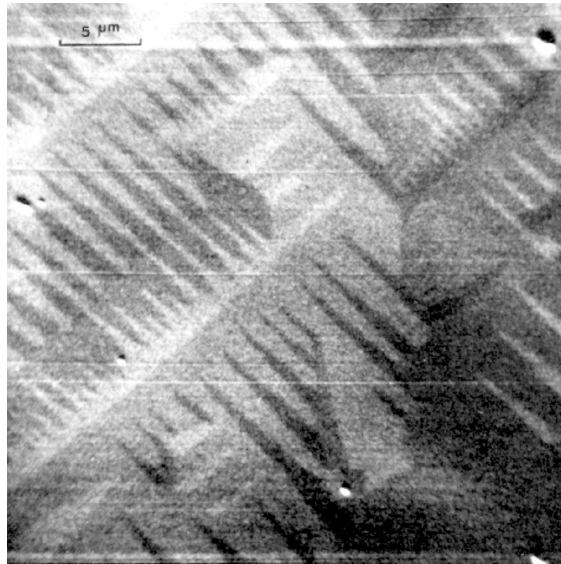


Oxydes

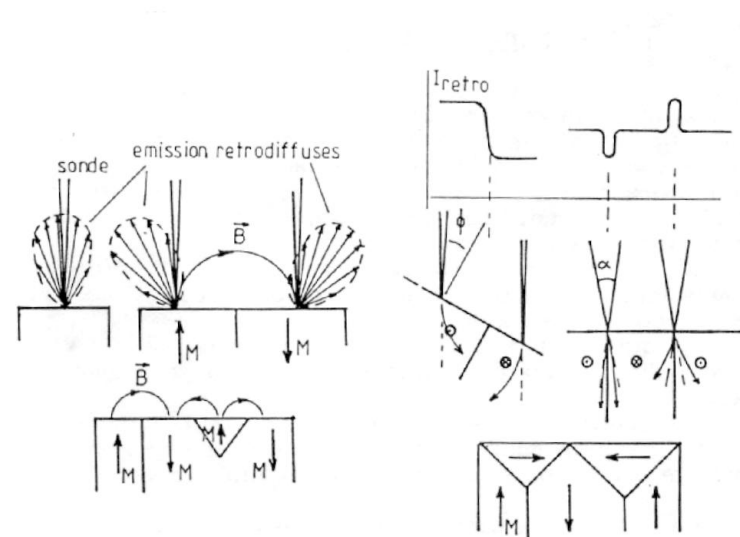
rendement d'émission secondaire

(documents J. Cazaux)

Echantillon magnétique

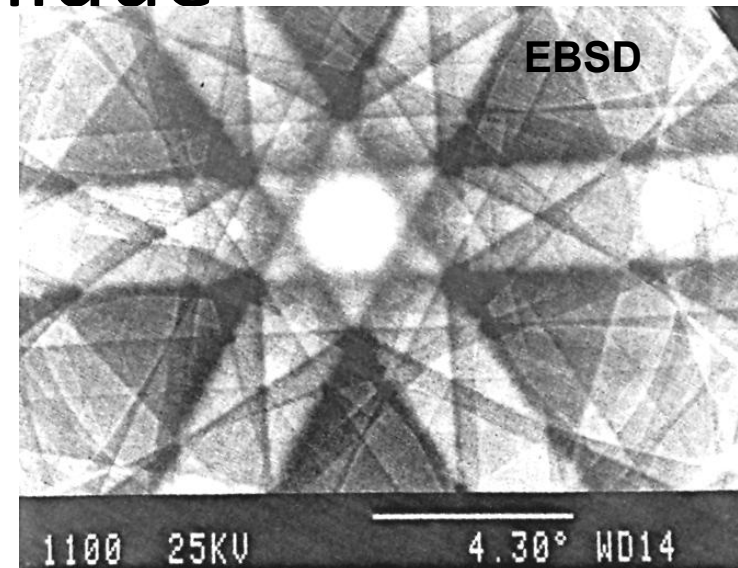
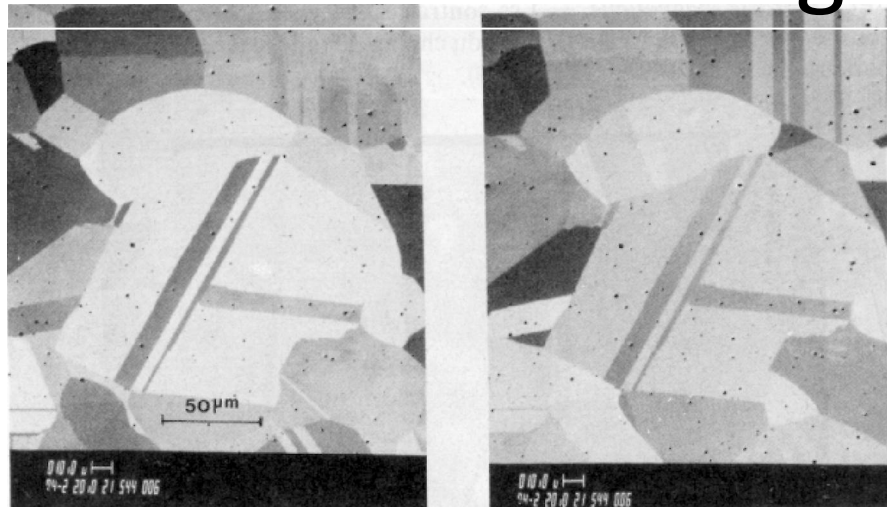


contrastes magnétiques



Structure cristallographique

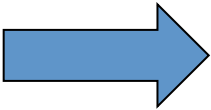
contraste cristallin



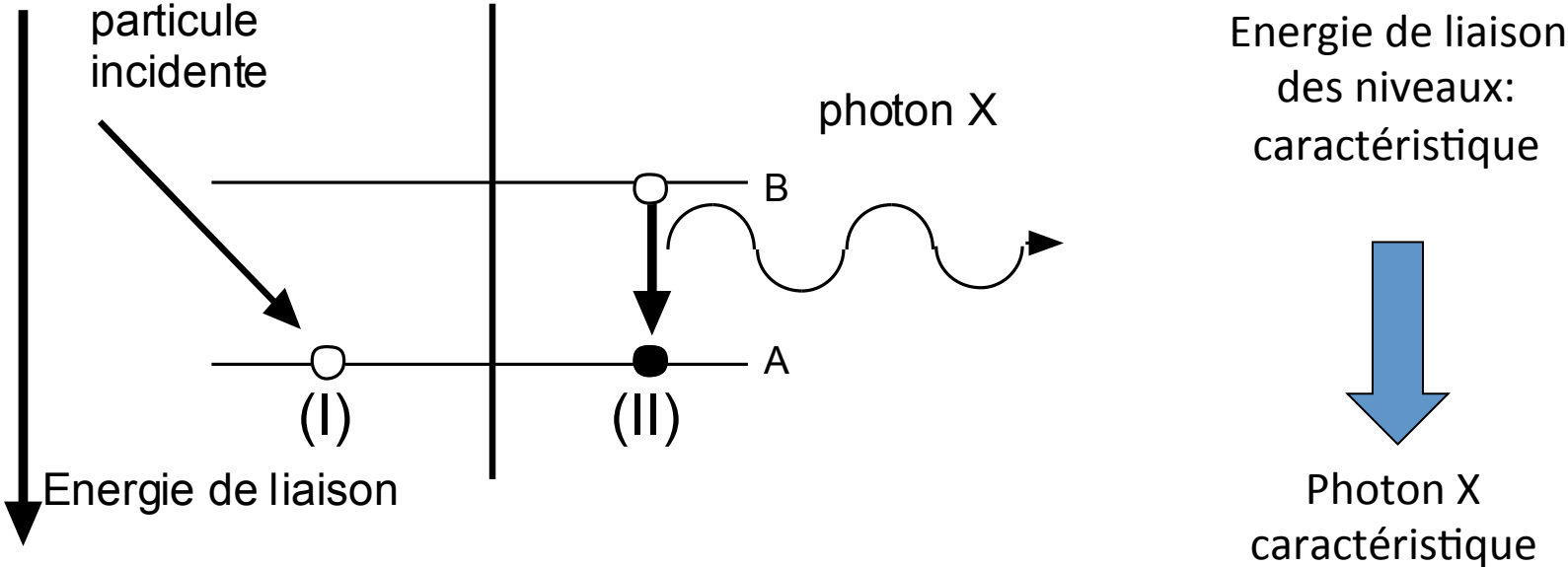
L'émission X caractéristique

Principe

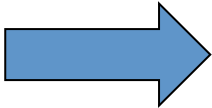
Décroissance radiative
d'un état ionisé d'un atome



Photon X



ionisation



- **électron**
- ion
- photon



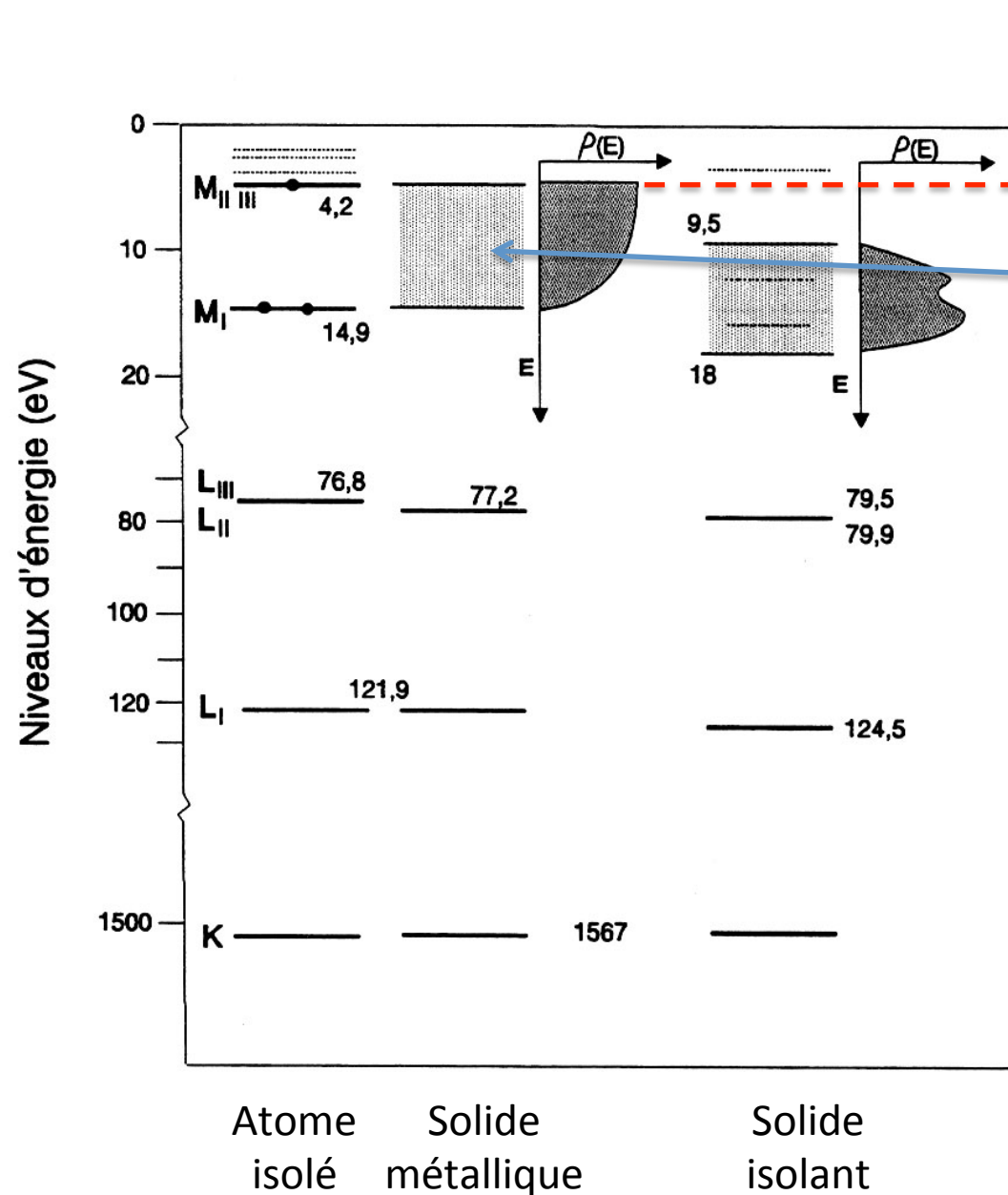
- EPMA
- PIXE
- XRF

Niveaux électroniques

Répartition des électrons dans des niveaux électroniques caractérisés par 3 nombres quantiques :

- n : nombre quantique principal
couche ($n=1$: K; $n=2$: L; ...)
- l : nombre quantique azimuthal ($0 - n-1$)
sous-couche ($l=0$: s; $l=1$: p; $l=2$: d; ...)
- j : nombre quantique *de moment angulaire total*
($l \pm m_s = l \pm 1/2$)
 $2j+1$ électron par sous-couche nlj
 $1s (1s_{1/2}) : n = 1; l = 0; j = 1/2$
 $3d_{3/2,5/2} : n = 3; l = 2; j = 3/2, 5/2$

Structure électronique de l'aluminium



Électrons libres

Niveau du vide

Niveau de Fermi

Bande de valence

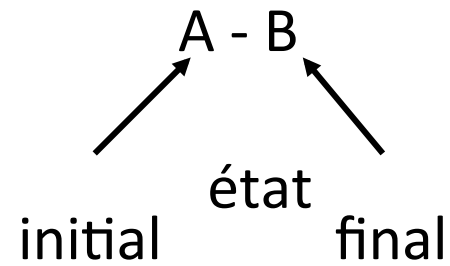
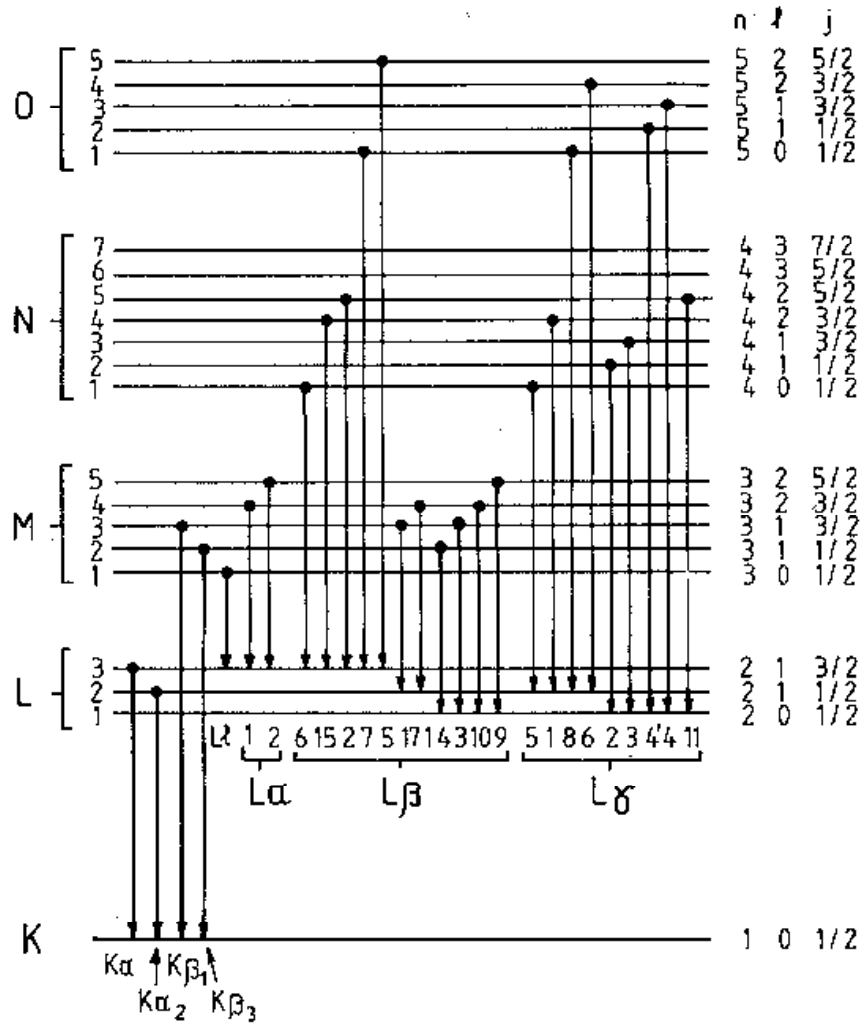
États occupés

Électrons liés

La structure électronique
varie avec la liaison
chimique

On peut observer une
modification des
énergies de certains
niveaux de cœur en
fonction de la liaison
chimique.

Nomenclature des transitions X



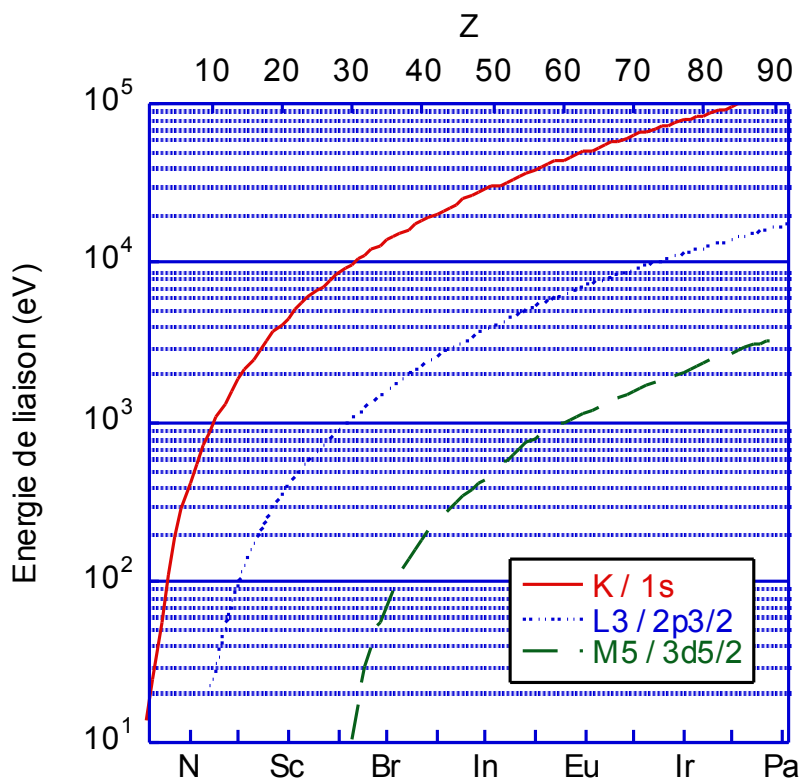
- $1s-2p_{3/2}$ K-L3 $K\alpha_1$
- $2p_{3/2}-3d_{5/2}$ L3-M5 $L\alpha_1$
- $3d_{5/2}-4f_{7/2}$ M5-N7 $M\alpha_1$

Ionisation en sous-couche de cœur

Observation transition A-B



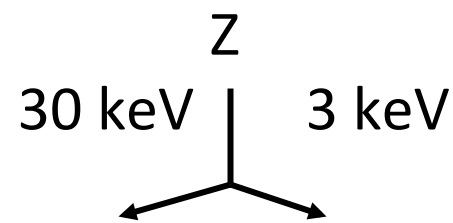
énergie des électrons
>
énergie de liaison E(A)



K α
(lacune 1s)

L α
(lacune 2p)

M α
(lacune 3d)



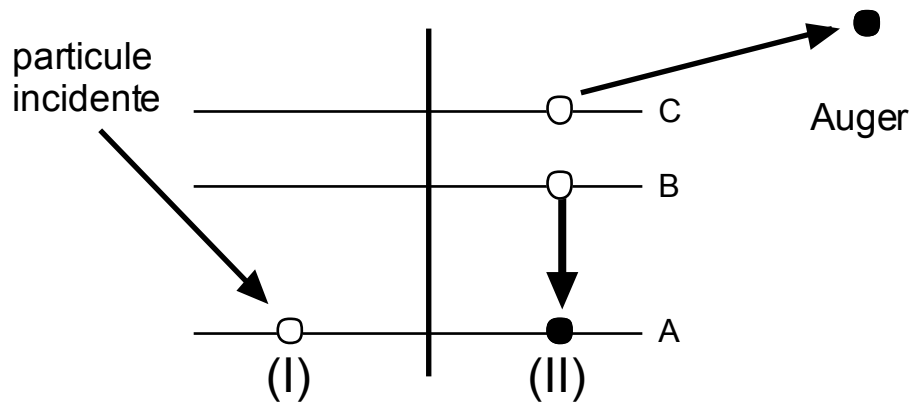
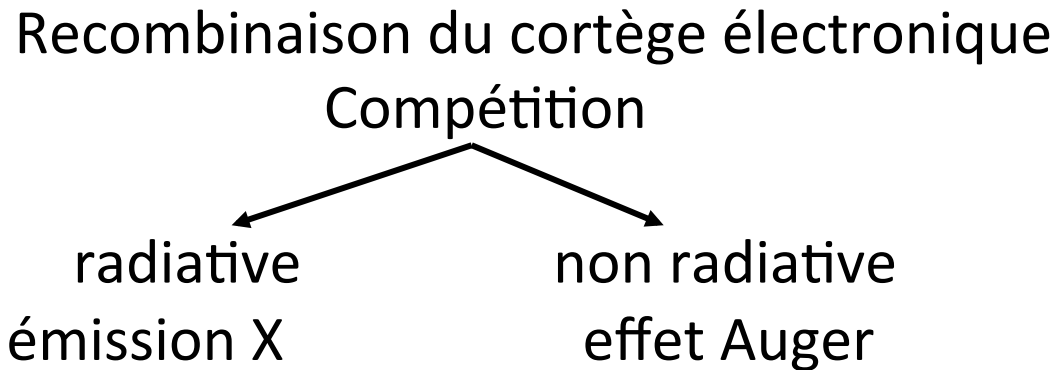
< 50 < 17
< 37 < 13

< 92 < 44
< 90 < 35

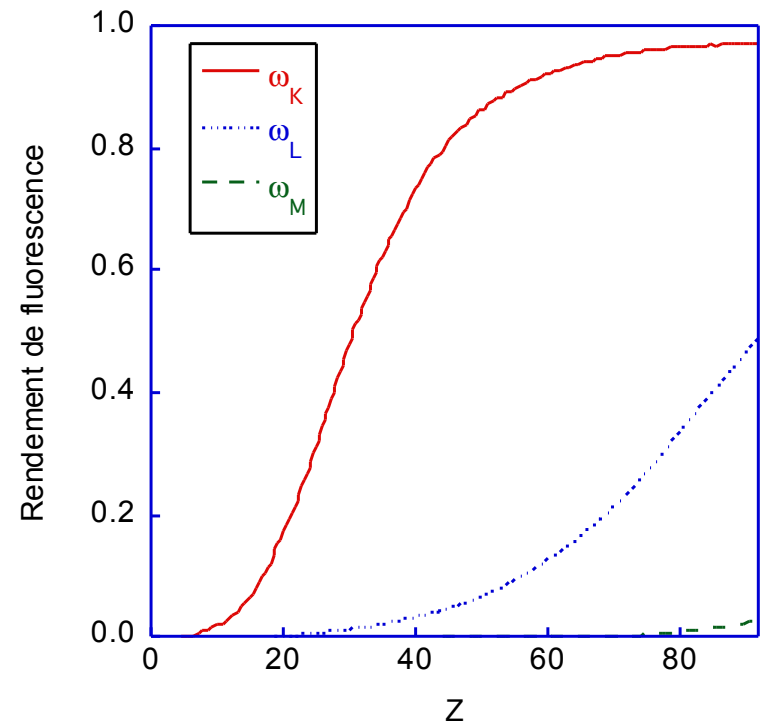
< 92 < 92
< 92 < 70

Rendement de fluorescence

Effet Auger

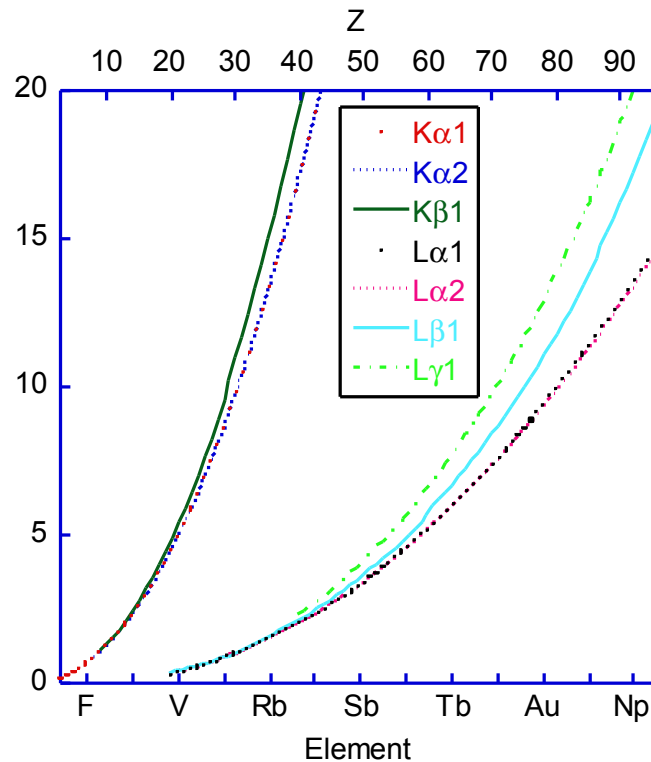


$$w_{nlj} = \frac{\sum W_R}{(\sum W_R + \sum W_{NR})}$$



Énergie

E est proportionnelle à Z^2



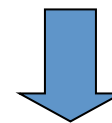
Gamme spectrale
des rayons X très large



Transition A-B



photon X caractéristique



énergie E

=

$$E_{\text{liaison}}(A) - E_{\text{liaison}}(B)$$

- WDS: différents spectromètres
 - cristal (transmission, réflexion)
 - réseau
- EDS: différents détecteurs
 - scintillateur
 - diode

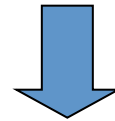
Raie atomique

Transition A-B

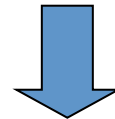
Forme $D = D(A) \times D(B)$ ← Distribution en énergie des états

Produit de convolution

Si A et B niveaux de cœur ($E_{\text{liaison}} > 30 \text{ eV}$)



$D(A)$ et $D(B)$ = courbes lorentziennes, largeurs $\Delta E(A)$ et $\Delta E(B)$



D = courbe lorentzienne, largeur $\Delta E(A) + \Delta E(B)$

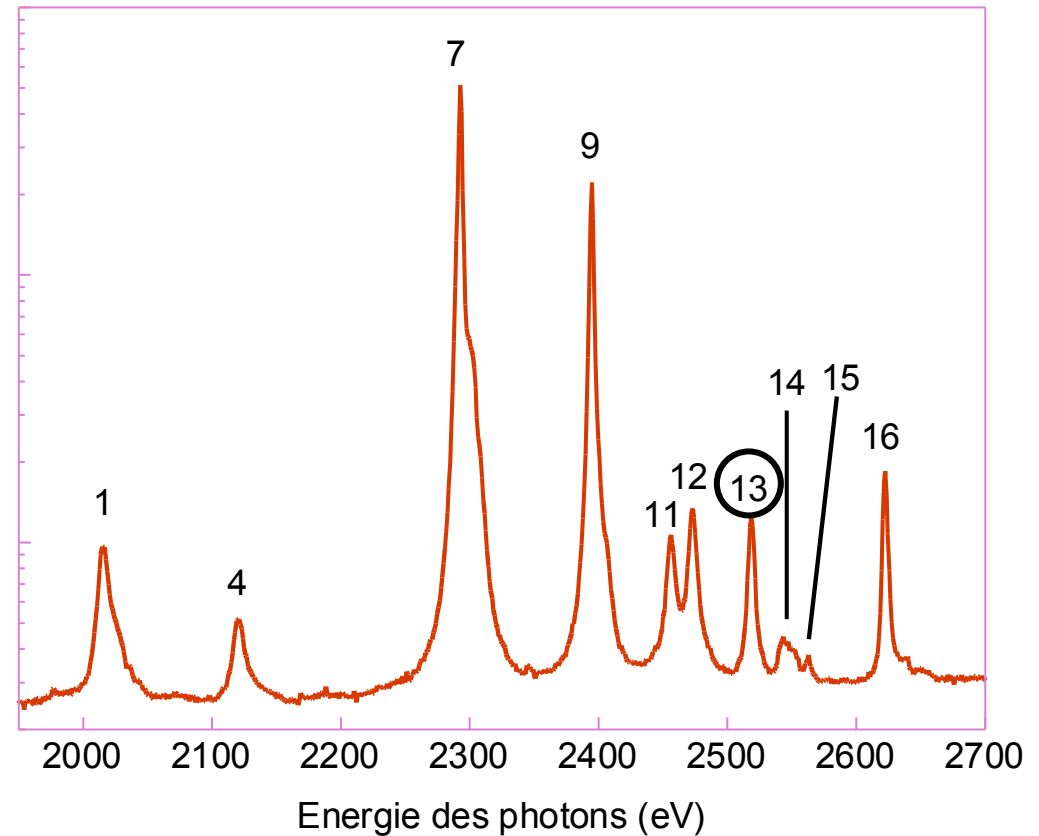
$$L(E) = \frac{I_{\text{max}}}{1 + \left[\frac{E - E_0}{\Gamma/2} \right]^2} \quad \Gamma: \text{largeur à mi-hauteur}$$

As (Z=33)

$$\Delta E_{1s} = 2,09 \text{ eV} \quad \Delta E_{2p_{3/2}} = 0,94 \text{ eV} \quad \Delta E(K\alpha_1) = 3,03 \text{ eV}$$

$$\Delta E_{2p_{3/2}} = 0,94 \text{ eV} \quad \Delta E_{3d_{5/2}} = 0,06 \text{ eV} \quad \Delta E(L\alpha_1) = 1,00 \text{ eV}$$

Spectre L du Molybdène (Z=42)



N°	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Nom	L1	Sat L1	Sat L1 ?	Lη	Sat Lη	Sat Lη ?	Lα _{1,2}	Sat Lα	Lβ ₁	Sat Lβ ₁
Transition	3s - 2p _{3/2}			3s - 2p _{1/2}			3d _{3/2} - 2p _{3/2} 3d _{3/2} - 2p _{3/2}		3d _{3/2} - 2p _{1/2}	
E (eV) *	2015,2	9,1	61	2120,5	10,5 29	65	2292,81 2289,62	9,3	2394,72	10,7
E _{table} (eV)	2015,7			2119,7			2293,19 2289,88		2394,83	
N°	11	12	13	14	15	16	17	18	19	
Nom	Lβ _{4,6}	Lβ ₃	Lβ ₂	Sat Lβ ₂	Lγ ₅	Lγ ₁ Cl Kα _{1,2}	Cl Kβ	Lγ _{2,3}	Sat Lγ _{2,3}	
Transition	3p _{1/2} α 2s 4s - 2p _{3/2}	3p _{3/2} α 2s	4d - 2p _{3/2}		4s - 2p _{1/2}	4d - 2p _{1/2} 2p _{3/2,1/2} α 1s	3p α 1s	4p _{3/2,1/2} α 2s		
E (eV) *	2456,2	2473,0	2518,65	25 33	2563,3	2622,5	2816,4	2830,7	19,7	
E _{table} (eV)	2458,4	2473,0	2518,3		2563,2	2623,5		2830,7		

Bande de valence

Transition A-B

A : niveau de cœur; B : bande de valence

$\Delta E(A)$

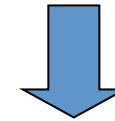
$\Delta E(B)$

petit (0,1 - 2 eV)

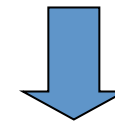
large (2 - 15 eV)



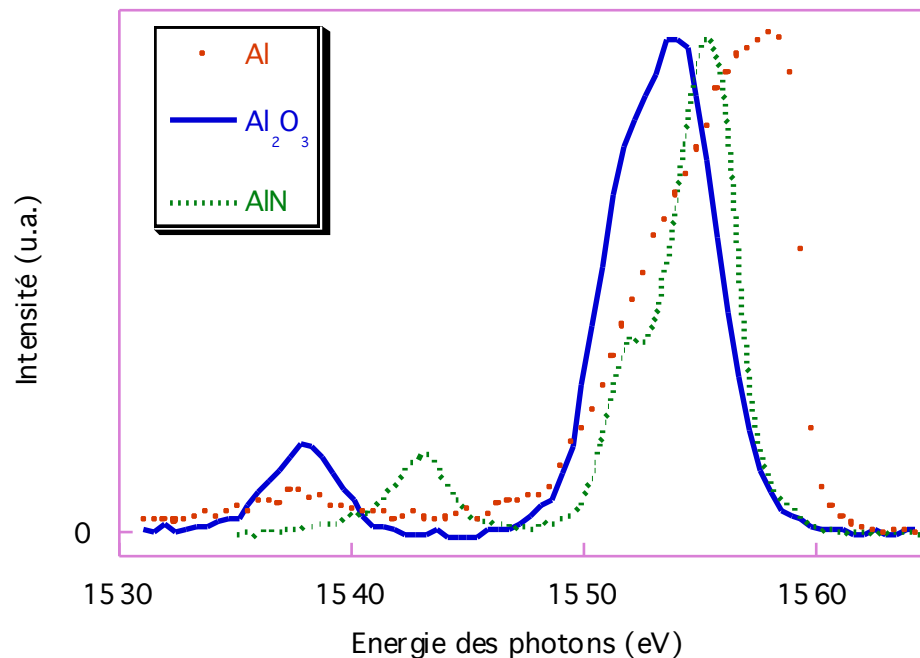
Description des états de valence



états les moins liés



information physico-chimique



Bande d'émission Al K β
transition 1s - 3p

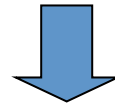
Probabilité de transition radiative

Transition A-B

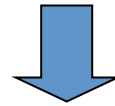
$$W \propto n^3 |M_{AB}|^2$$

$|M_{AB}|$ élément de matrice

- fonction d'onde état initial (A)
- fonction d'onde état final (B)
- Hamiltonien d'interaction



Approximation dipolaire électrique



Règles de sélection dipolaires électriques

$$\Delta l = \pm 1 \quad (\Delta j = 0, \pm 1)$$



Toutes les transitions ne sont pas permises

$$p \rightarrow s \quad s, d \rightarrow p \quad p, f \rightarrow d$$

Nombre d'états initiaux

État initial = état ionisé dans sous-couche nlj

$$\text{Par unité de temps : } N_{nlj} = P_{nlj} n_i$$

nombre de
lacunes créées par
électron incident

nombre d'électrons
incidents par unité
de temps

$$P_{nlj} \propto \int_{E_0}^{E_{nlj}} \frac{Q_{nlj}(E)}{dE/ds} dE$$

Q : section efficace
dE/ds : perte d'énergie moyenne

Corrections - perte d'ionisation (rétrodiffusion)
- gain d'ionisation (effet Auger)

Poids des raies

Probabilité d'émission (W) d'une transition donnée par rapport à toutes les transitions possibles ($\sum W_R + \sum W_{NR}$)

Une lacune  Plusieurs transitions radiatives ($\sum W_R$)

- Spectre Mo L
- vers 2s : $L\beta_{3,4}$ (3p); $L\gamma_{2,3}$ (4p);
 - vers $2p_{1/2}$: $L\beta_1$ (3d); γ_{4d} ; $L\delta_5$ (4s); $L\eta$ (3s)
 - vers $2p_{3/2}$: $L\alpha$ (3d); $L\beta_2$ (4d); $L\beta_6$ (4s); $L\iota$ (3s)

$$p = \frac{W}{\sum (W_R + W_{NR})} = \frac{W}{\sum W_R} \frac{\sum W_R}{\sum (W_R + W_{NR})} = \frac{W}{\sum W_R} \omega_{nlj}$$

spectre K

$$Z_{K\alpha} + Z_{K\beta} = 1$$

$$11 \leq Z \leq 19$$

$$Z_{K\alpha} = 1,052 - 4,39 \cdot 10^{-4} Z^2$$

$$20 \leq Z \leq 29$$

$$Z_{K\alpha} = 0,896 - 4,39 \cdot 10^{-4} Z$$

$$30 \leq Z \leq 60$$

$$Z_{K\alpha} = 1,0366 - 6,82 \cdot 10^{-3} Z + 4,815 \cdot 10^{-5} Z^2$$

spectre L

$$37 \leq Z \leq 44$$

$$Z_{L\alpha} = 0,944$$

$$45 \leq Z \leq 83$$

$$Z_{L\alpha} = -0,4461 + 5,493 \cdot 10^{-2} Z - 7,717 \cdot 10^{-4} Z^2 + 3,525 \cdot 10^{-6} Z^3$$

spectre M

$$Z > 75 \quad Z_{M\alpha} \approx 1$$

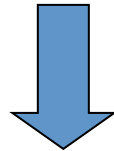
Intensités relatives

Si plusieurs transitions vers un niveau nlj
la plus intense vient de : **$n+1$ $l+1$ $j+1$**

Intensités relatives données par le poids statistique
 $g = 2j+1$

doublet $K\alpha_{1,2}$ transitions $1s-2p_{3/2,1/2}$

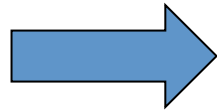
$$\frac{I(\alpha_1)}{I(\alpha_2)} = \frac{g(2p_{3/2})}{g(2p_{1/2})} = \frac{4}{2} = 2$$



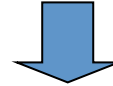
$K\alpha_1$ deux fois plus intense que $K\alpha_2$

Intensité $K\beta / K\alpha$

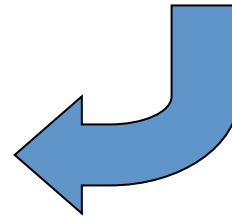
$K\beta : 3p - 1s$
 $K\alpha : 2p - 1s$



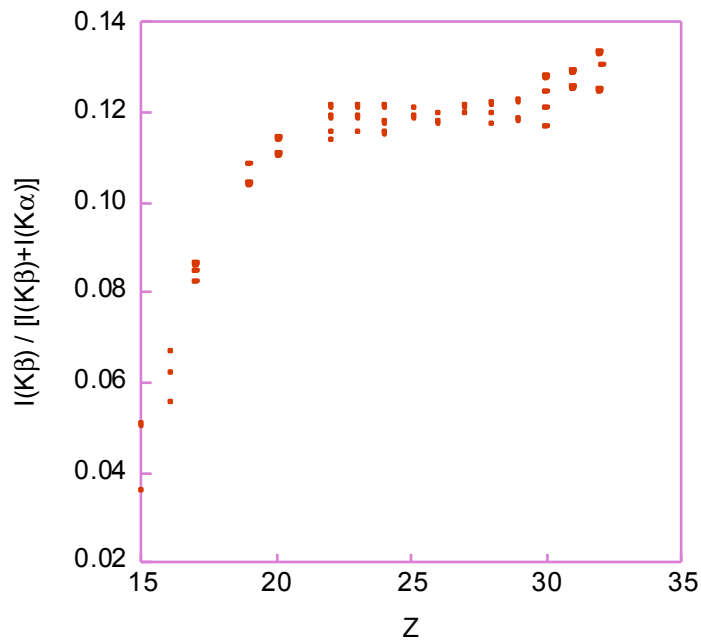
Différentes couches mis en jeu



Pas de règle pour les intensités relatives



Utilisation de compilations



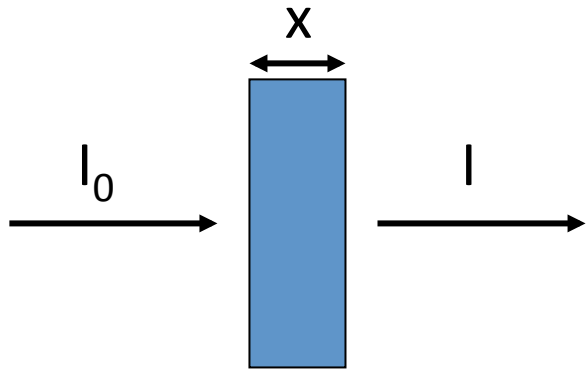
Remarque

Pour $Z \leq 17$, $K\beta$: bande de valence



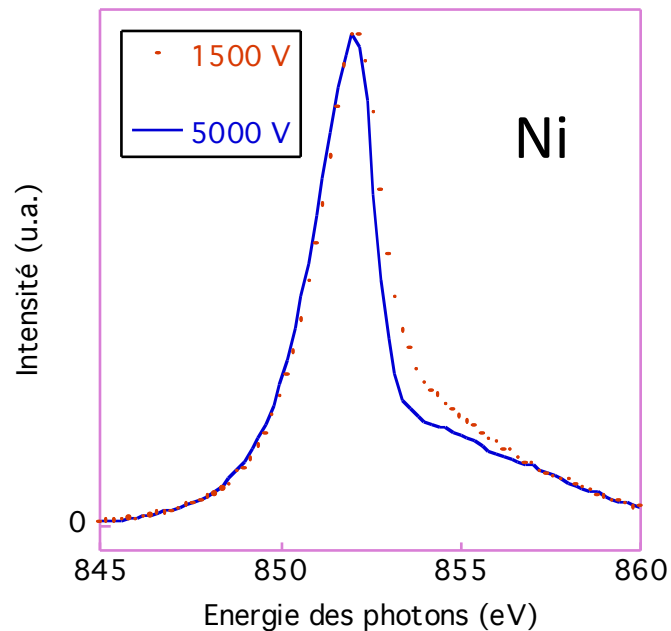
$I(K\beta)$ dépend de l'état chimique

Absorption



$$I = I_0 \exp(-\mu x)$$

μ coefficient d'absorption linéaire
dépend de l'énergie du photon
dépend de l'état chimique



Important pour éléments avec
sous-couche d ou f ouverte

$1 \leq nb e^- d \leq 9$: métaux de transition
 $1 \leq nb e^- f \leq 13$: lanthanides
actinides

Intensité

- A une profondeur z donnée
- Générée par un électron d'énergie E

$$I(h\nu) = A h\nu \left(\frac{W}{\sum W_R} \omega_{nlj} \right) N_Z \exp(-\mu(h\nu) y) Q_{nlj}(E)$$

Poids de la raie Nb atomes absorption ionisation

constante :

Angle solide

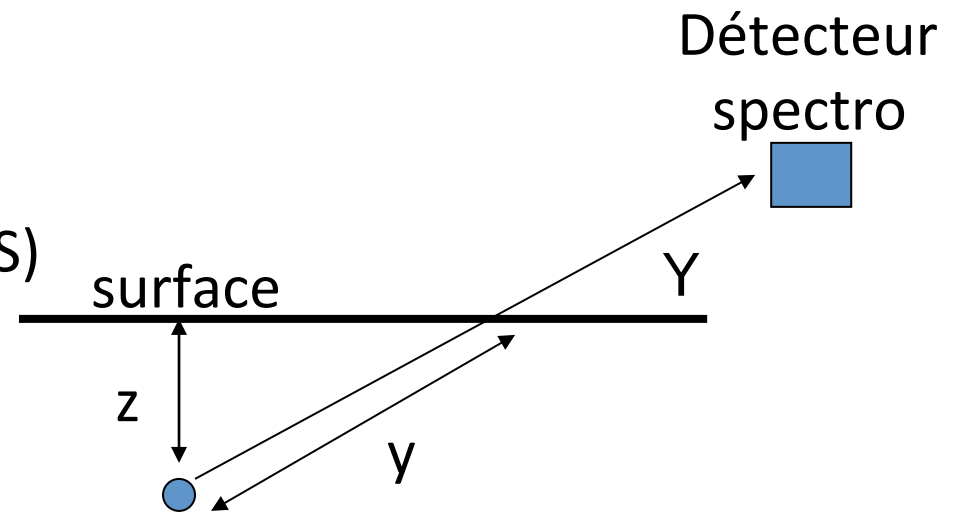
Débit électronique

Efficacité détecteur (EDS, WDS)

Réflectivité cristal (WDS)

Valeur absolue Q

...



Fonction d'ionisation

Intensité émise dans toute l'épaisseur $[0 - z_{\max}]$

$$E = E_0$$

$$E \leq E_{nlj}$$



Distribution des ionisations en fonction profondeur
fonction d'ionisation

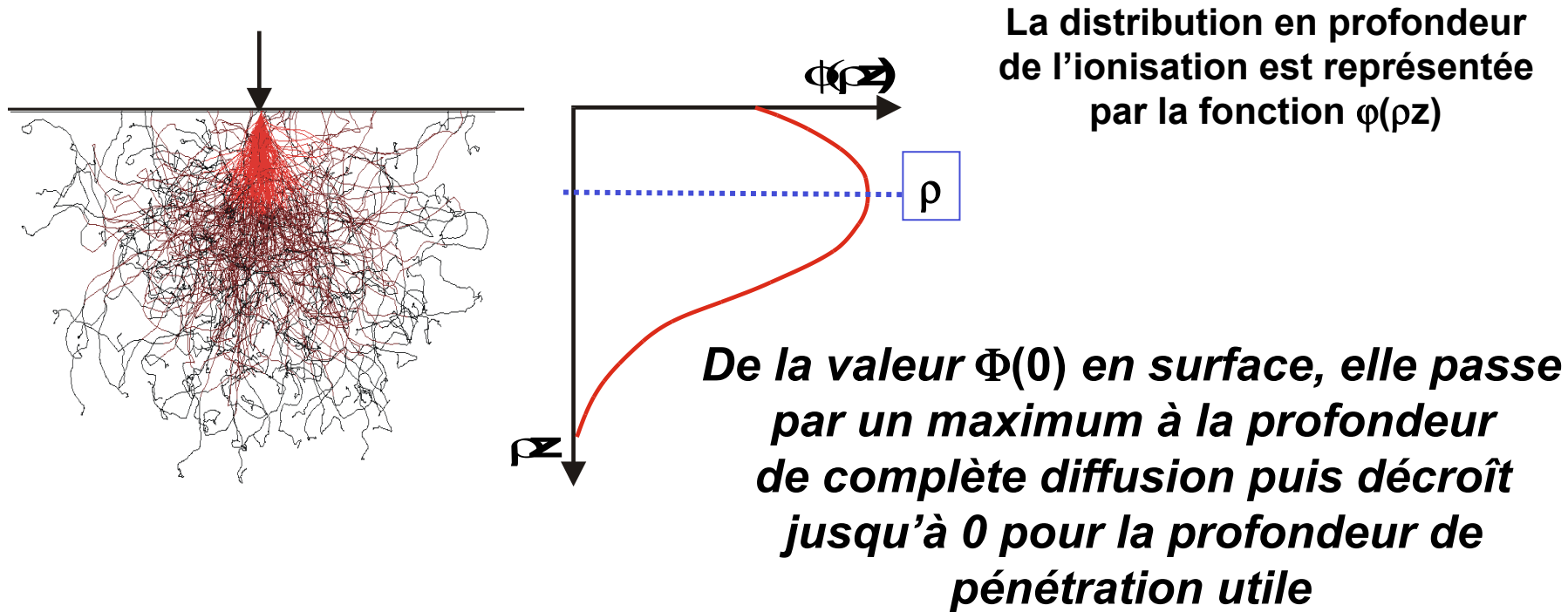
$$F(z)$$



prise en compte phénomènes élastiques et inélastiques

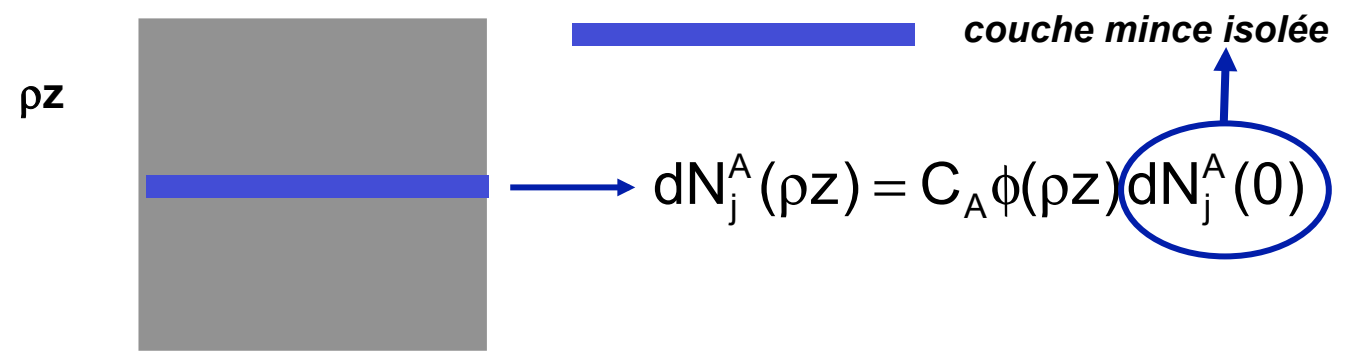
- perte d'énergie
- perte en nombre
- changement du parcours

$$I = C \int_0^{z_{\max}} N(z) \exp\left(-\frac{\mu z}{\sin \Psi}\right) \Phi(z) dz$$

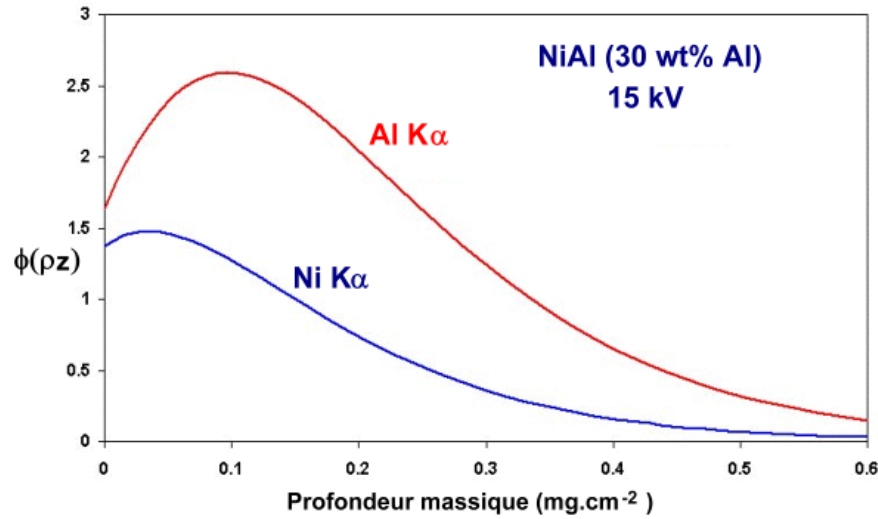


Définition de $\Phi(\rho z)$:

Nombre d'ionisations engendrées dans une couche mince à la profondeur ρ

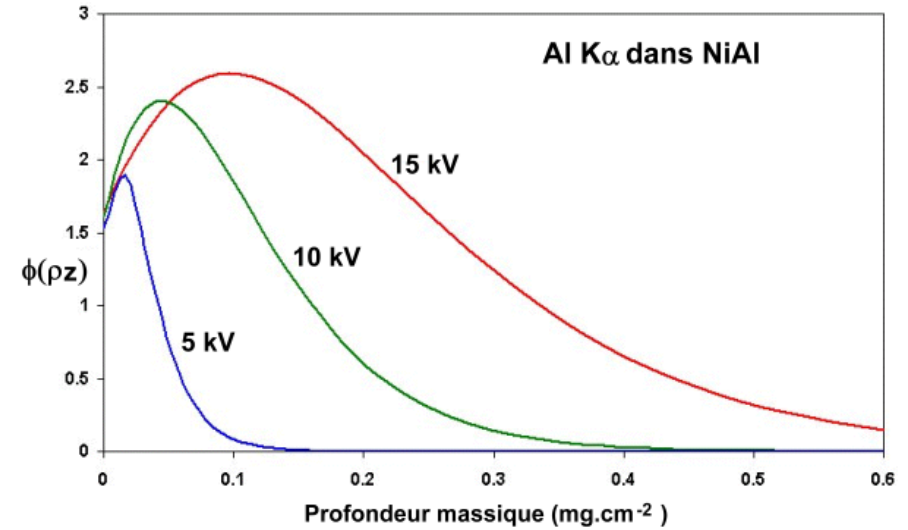


Exemples

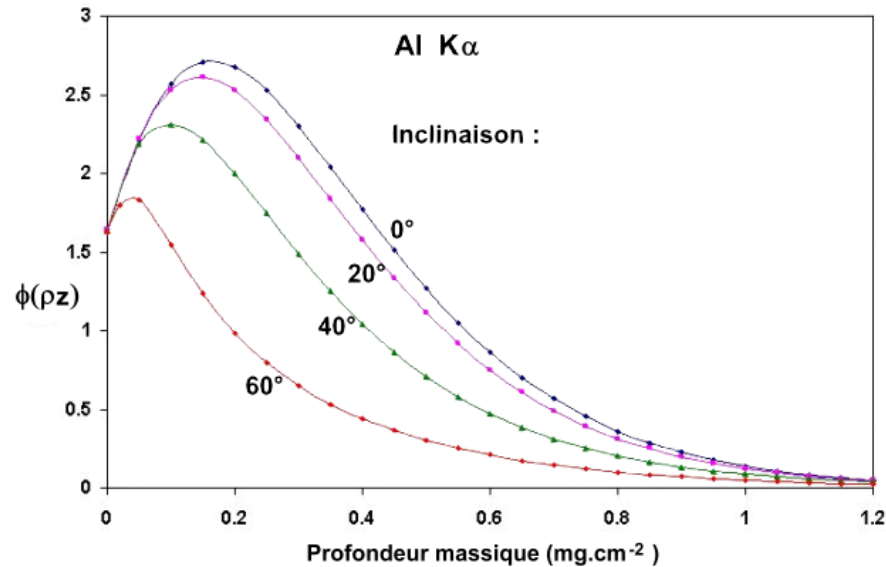


Al K α et Ni K α dans NiAl(30%) à 15 kV

Al K α dans NiAl(30%) à 5, 10 et 15 kV



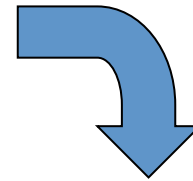
Influence de l'inclinaison de l'échantillon sur la fonction $\Phi(\rho z)$



$$dN_j^A(\rho z) = C_A \frac{1}{\cos \beta} \phi(\rho z) dN_j^A(0)$$

Quantification

- Utilisation échantillon de référence standard → simplification C
- Mesure I
- Connaissance F
- Connaissance m



Détermination $N_z(z)$

Corrections intensité

- gain d'intensité due à la fluorescence
- gain d'intensité due au rayonnement de freinage
- ...

Ionisation multiple

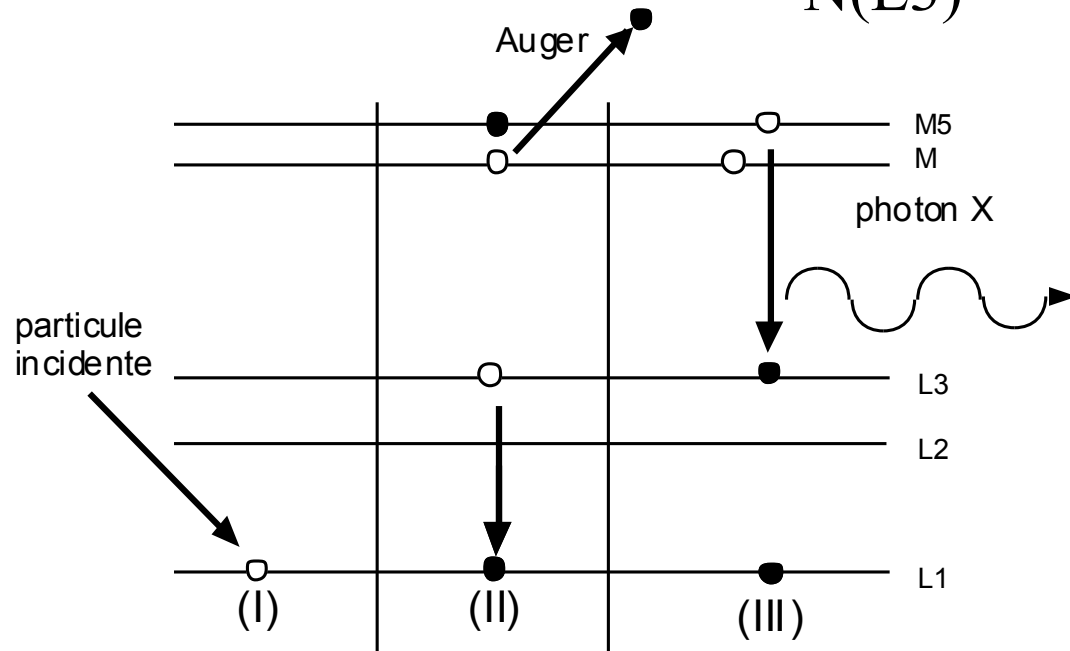
Effet Auger : Coster-Kronig super-Coster-Kronig



Modification du nombre initial de lacunes

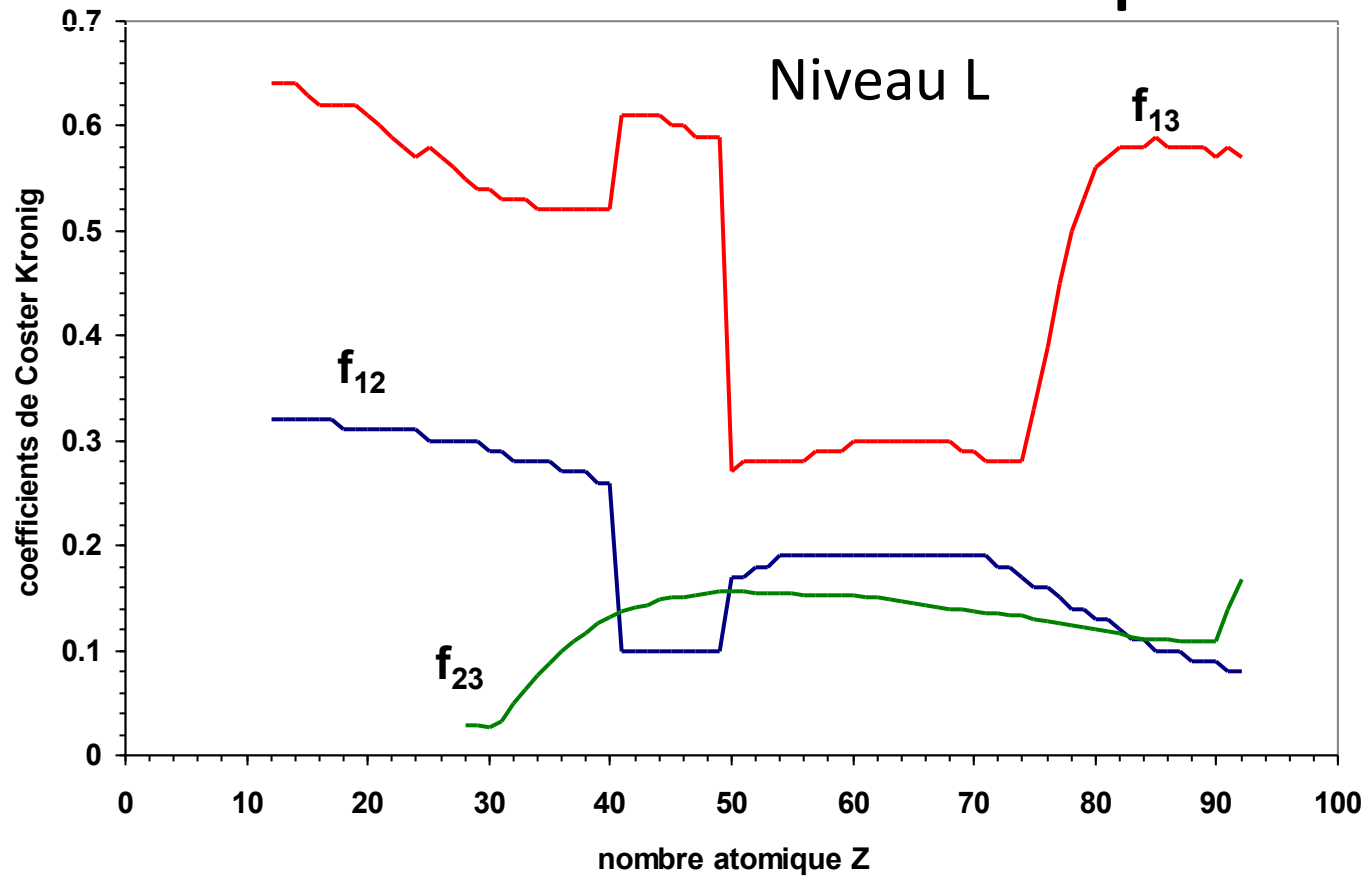


$$N(L3) = n(L3) + f_{23} n(L2) + (f_{13} + f_{12}f_{23}) n(L1)$$



Effet shake-off

Variation des coefficients de Coster-Kronig avec le numéro atomique



rendement de fluorescence moyen du niveau L_3 \rightarrow
$$\bar{\omega}_{L_3} = \left[1 + \frac{1}{2} f_{13} + \frac{1}{2} (1 + f_{12}) f_{23} \right] \omega_{L_3}$$

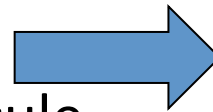
Emissions satellites

transition dans
atome multiplement ionisé

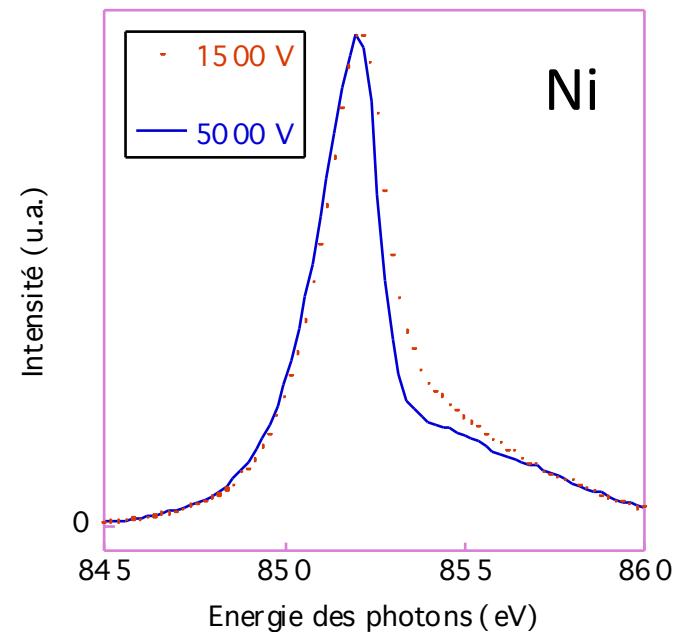
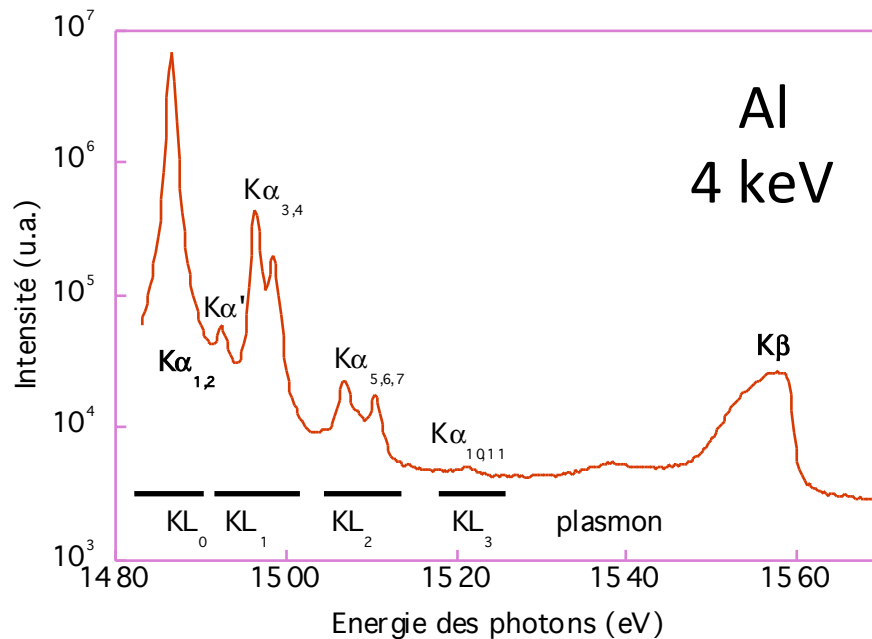


grande énergie
intensité importante (10%)

émission simultanée
du photon et d'une autre particule



petite énergie
faible intensité (1%)



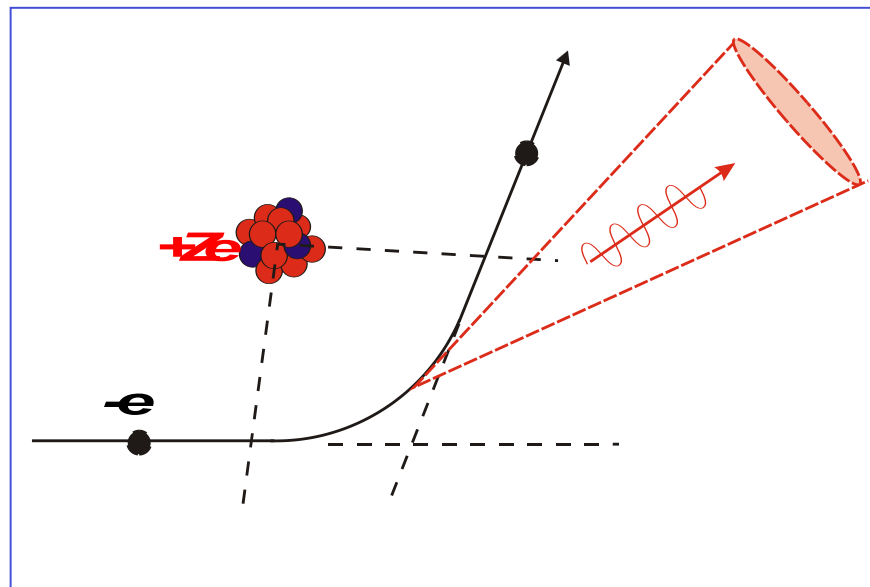
Le rayonnement de freinage

Interaction inélastique électron - noyau atomique

Décélération
particule chargée



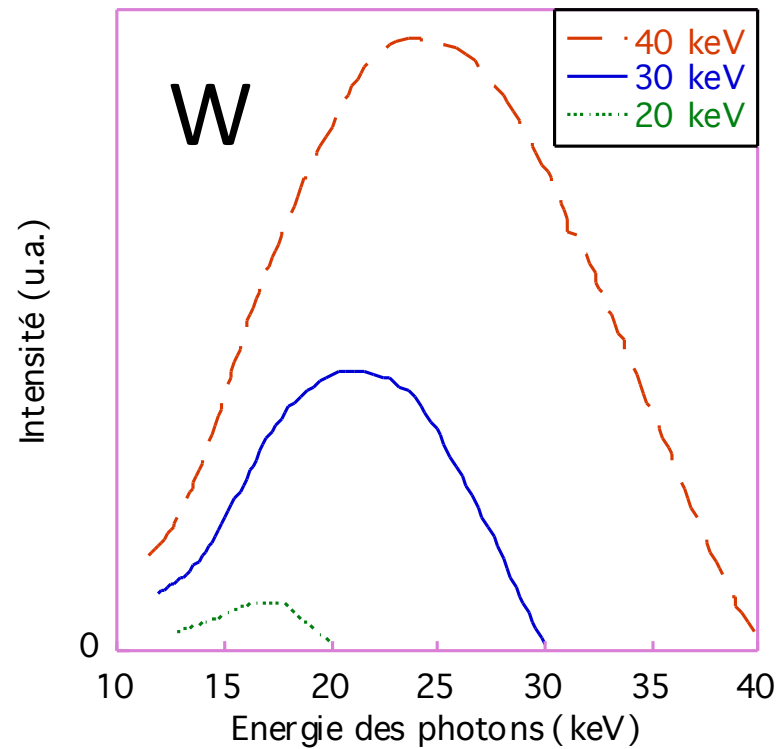
Emission de
rayonnement électromagnétique



Bremsstrahlung

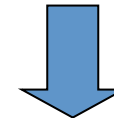
Toutes les pertes d'énergie possibles

Rayonnement continu entre [0 - énergie e^- incident]



- Intensité proportionnelle à E_0^2, Z^2
- Maximum à $E_0/1,5$

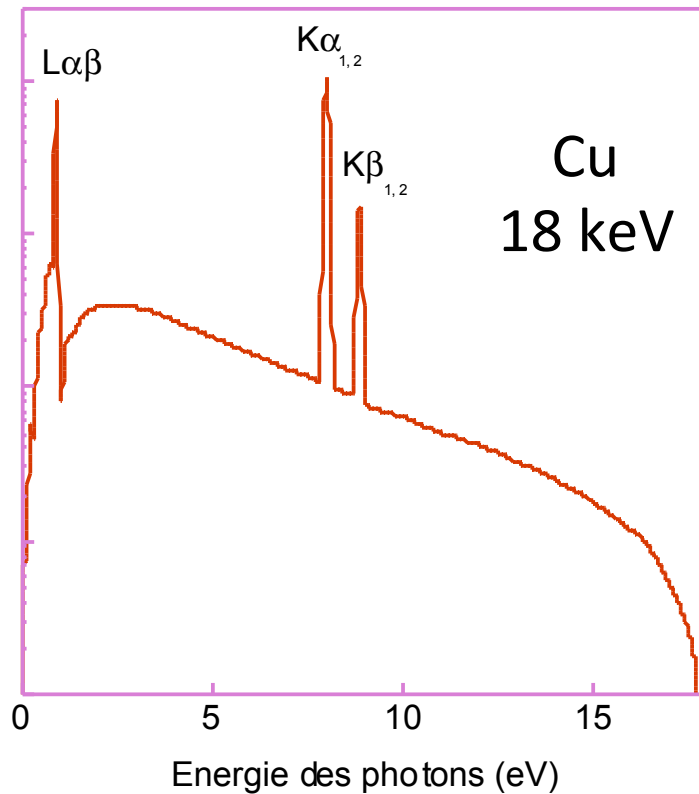
Peut créer des ionisations



Génération rayons X caractéristiques

Fond continu

Rayonnement de freinage = fond continu
sous rayonnement caractéristique



détermine

- limite de détection
(avec la statistique de comptage)
- forme du fond
(important quand large domaine spectral analysé : EDS)

Attention

en WDS et avec des multicouches périodiques (pour analyse des petites énergies)
du côté des petites angles de Bragg, présence d'un fond dû à la [réflexion totale](#)

Les **émissions électronique et photonique** et donc **l'information** ne proviennent pas de la même région

