



ID de Contribution: 40

Type: Contribution orale

## Cristallographie quantique : pourquoi ne pas marier Bragg et Compton ?

*lundi 3 juillet 2023 17:05 (15 minutes)*

La plus grande partie de la cristallographie quantique a été développée dans l'espace des positions. Cet espace est généralement considéré comme celui offrant un point de vue privilégié pour étudier les liaisons chimiques. Ceci est amplement justifié par la relation directe entre la densité de probabilité de position des électrons et les facteurs de structure, qu'ils proviennent d'expériences de diffusion de Bragg des rayons X ou des neutrons polarisés. Cependant, puisque la cristallographie quantique ambitionne d'aller au-delà de la probabilité de présence et d'approcher le problème de la fonction d'onde, il devient légitime de s'interroger sur la pertinence d'ignorer une moitié entière de l'espace des phases : celle relative aux vitesses des électrons. On sait depuis Compton et duMond que l'information dans l'espace des impulsions est disponible à partir de la mesure de la diffusion inélastique des rayons X et qu'elle pourrait être combinée (sinon confrontée) avec celle dans l'espace des positions.

L'exposé évoquera certains des avantages, ainsi que les contraintes et difficultés associées, au développement d'une vision de l'espace des phases de la cristallographie quantique. Nous décrirons ainsi comment une approche de la cristallographie quantique peut être construite à partir des observables de l'espace des phases, ce que les dernières tentatives nous ont appris et à quel point nous sommes proches d'obtenir une vision plus large du comportement des électrons, débordant le seul espace des positions.

### Affiliation de l'auteur principal

CentraleSupélec Paris-Saclay

**Auteurs principaux:** GILLET, Jean-Michel (CentraleSupélec Université Paris Saclay); YU, Sizhuo

**Orateur:** GILLET, Jean-Michel (CentraleSupélec Université Paris Saclay)

**Classification de Session:** Mini-colloques: MC07 Les 100 ans de l'effet Compton : des sources aux applications

**Classification de thématique:** MC7 Les 100 ans de l'effet Compton : des sources aux applications