Diffusion (non-résonnante) de photons par un atome (suite et fin).

Remarque : Amplitude d'absorption de 2 photons.

Supposons qu'au lieu d'avoir un photon $\vec{\varepsilon}, \vec{k}$ détruit et un autre $\vec{\varepsilon}', \vec{k}'$ créé, on ait les 2 photons $\vec{\varepsilon}, \vec{k}$ et $\vec{\varepsilon}', \vec{k}'$ détruits. On s'intéresse dans ce cas à un phénomène d'absorption à 2 photons, la condition de conservation de l'énergie s'écrivant

$$E_a + \hbar\omega + \hbar\omega' = E_b \qquad (IX-1)$$

les calculs présentés plus haut se généralisent aisément à cette nouvelle situation. L'équivalent des processus représentés sur les figures 4, 5a, 5b est :

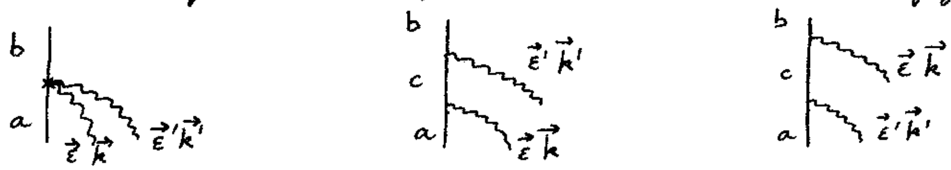


Fig 6

L'état c doit être ici considéré comme un état "relais". Comme plus haut, nous excluons le cas $E_c = E_a + \hbar\omega$ (et, en plus, le cas $E_c = E_a + \hbar\omega'$) où le niveau relais est résonnant pour l'absorption de l'un des 2 photons.

On trouve aisément l'amplitude de probabilité associée à l'ensemble des processus de la figure 6. A l'approximation dipolaire électrique, les formules qui généralisent (VIII-21) et (VIII-24) sont :

$$\mathcal{S}_{b,a\vec{k}\vec{\varepsilon}\,\vec{k}'\vec{\varepsilon}'} = -2\pi i\, \delta^{(T)}(E_a + \hbar\omega + \hbar\omega' - E_b)\, \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \sqrt{\omega\omega'}}\, \frac{e^2}{m}\, \mathcal{T}_{b,a\vec{k}\vec{\varepsilon}\,\vec{k}'\vec{\varepsilon}'} \qquad (IX-2)$$

$$\mathcal{T}_{b,a\vec{k}\vec{\varepsilon}\,\vec{k}'\vec{\varepsilon}'} = \underbrace{Z\, \vec{\varepsilon}'\cdot\vec{\varepsilon}\, \langle b|a\rangle}_{=0} + \frac{1}{m} \lim_{\eta\to 0_+} \sum_{\substack{c\\ \alpha\\ \alpha'}} \left[\frac{(\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{p}_{\alpha'})_{bc}(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}_\alpha)_{ca}}{E_a + i\eta + \hbar\omega - E_c} + \frac{(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}_\alpha)_{bc}(\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{p}_{\alpha'})_{ca}}{\underbrace{E_a + i\eta + \hbar\omega' - E_c}_{= E_b + i\eta - \hbar\omega - E_c \text{ (d'après IX-1)}}} \right] \qquad (IX-3)$$

L'expression (IX-3) peut être transformée de la même manière que (VIII-24). Il suffit de remarquer, d'une part, que le dernier dénominateur d'énergie de IX-3 peut être transformé, grâce à IX-1, en $E_b + i\eta - \hbar\omega - E_c$, d'autre part que VIII-39 et VIII-40 demeurent valables compte tenu de IX-1 à condition toutefois de changer le signe des derniers termes des seconds membres.

On obtient alors immédiatement, par un calcul analogue à celui des pages VIII-7 et VIII-8 :

$$\mathcal{T}_{b,a\vec{k}\vec{\varepsilon}\,\vec{k}'\vec{\varepsilon}'} = m\omega\omega' \lim_{\eta\to 0_+} \sum_{c\,\alpha\,\alpha'} \left[\frac{(\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{r}_{\alpha'})_{bc}(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}_\alpha)_{ca}}{E_a + i\eta + \hbar\omega - E_c} + \frac{(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}_\alpha)_{bc}(\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{r}_{\alpha'})_{ca}}{\underbrace{E_a + i\eta + \hbar\omega' - E_c}_{= E_b + i\eta - \hbar\omega - E_c}} \right] \qquad (IX-4)$$

C - Discussion physique.

(1) Rappel de quelques résultats relatifs à la diffusion par un électron classique élastiquement lié.

On calcule le mouvement forcé d'un électron classique élastiquement lié à un point O (fréquence propre ω_0) et irradié par une onde plane $E e^{i\omega t}$. On tient compte de l'amortissement par rayonnement de cet électron. En calculant l'énergie rayonnée par unité de temps et en la divisant par le flux incident on obtient pour la section efficace de diffusion les résultats représentés sur la figure 7.

Pour $\omega \ll \omega_0$, σ est de l'ordre de $r_0^2 (\omega/\omega_0)^4$ et croît donc très vite avec ω.

Pour $\omega \gg \omega_0$, σ tend vers une constante de l'ordre de r_0^2

Pour $\omega \sim \omega_0$, σ subit une variation résonnante très aiguë et passe par un maximum de l'ordre de λ_0^2 où $\lambda_0 = c/\omega_0$ est la longueur d'onde du rayonnement ω_0

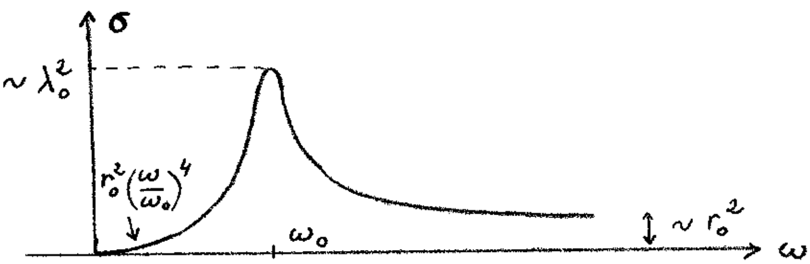
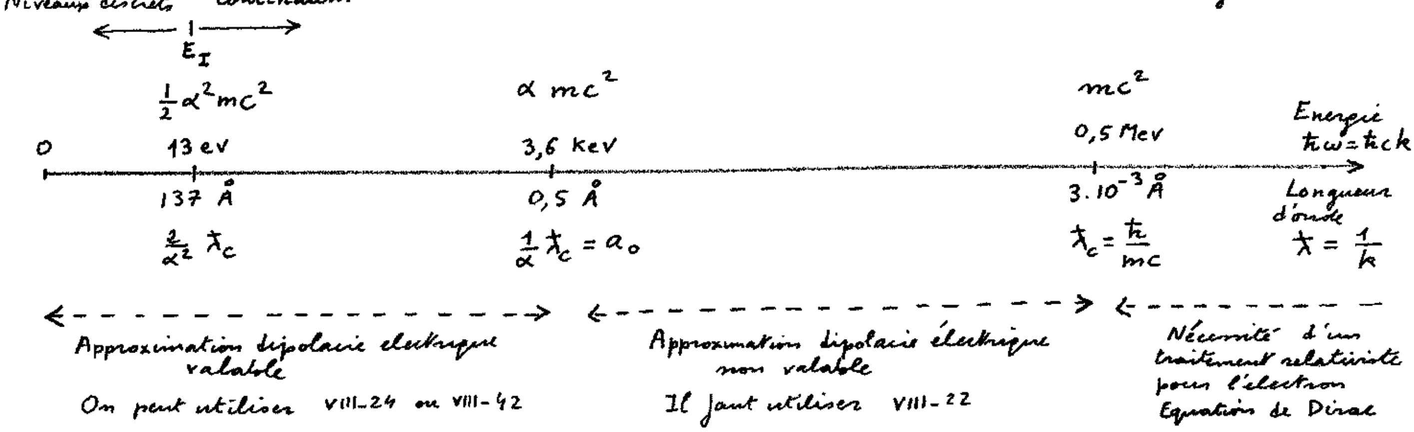


Figure 7

② Distinction de différents domaines d'énergie et de longueur d'onde pour le photon incident.

On considère pour simplifier le cas de l'atome H.

Figure 8



(les figures 7 et 8 ne sont évidemment pas à l'échelle).

③ Rayonnement incident de fréquence très basse : $\hbar\omega \ll E_c - E_a$.

a) Diffusion élastique : diffusion Rayleigh ($a = b$, $\omega = \omega'$)

– Vaut-il mieux utiliser VIII-24 ou VIII-42 ?

Considérons tout d'abord VIII-24 (où l'on fait $b = a$ et $\omega = \omega'$). Le 1er terme n'est pas nul et vaut $Z\,\vec{\varepsilon}\,'.\vec{\varepsilon}$. D'autre part, comme $\hbar\omega \ll E_c - E_a$, on peut remplacer $\hbar\omega$ par 0 dans les dénominateurs des crochets de VIII-24. Mais si on se reporte alors à l'identité VIII-37, on voit qu'il y a compensation parfaite entre le 1er terme de VIII-24 et le second, calculé à l'ordre 0 en $\hbar\omega / E_c - E_a$. Il faut donc pousser plus loin le développement de ce terme, en fait jusqu'à l'ordre 2 car le terme d'ordre 1 est nul (il est proportionnel à $[\sum_{\alpha'} \vec{\varepsilon}\,'.\vec{r}_{\alpha'}, \sum_{\alpha} \vec{\varepsilon}.\vec{r}_\alpha]_{aa} = 0$). Tout en étant bien sûr correcte, l'expression VIII-24 n'est donc pas commode.

Considérons par contre VIII-42 (où l'on fait $\omega = \omega'$ et $b = a$). Si l'on néglige $\hbar\omega$ devant $E_c - E_a$ dans les dénominateurs d'énergie, on obtient pour le crochet de VIII-42 une quantité qui n'est pas nulle et que l'on reconnait aisément être $\frac{1}{e^2}\,\vec{\varepsilon}\,\overset{\Rightarrow}{\chi}_a\,\vec{\varepsilon}$ où $\overset{\Rightarrow}{\chi}_a$ est le tenseur susceptibilité statique de l'état a.

$$\chi_a^{ij} = e^2 \sum_{\alpha\alpha' c} \frac{(\vec{e}_i.\vec{r}_{\alpha'})_{ac}(\vec{e}_j.\vec{r}_\alpha)_{ca} + (\vec{e}_j.\vec{r}_\alpha)_{ac}(\vec{e}_i.\vec{r}_{\alpha'})_{ca}}{E_a - E_c} \qquad (IX-5)$$

On voit de plus à l'extérieur du crochet le facteur ω^2 qui exprime que l'ampli–

tude de diffusion varie comme ω^2 et donc la section efficace comme ω^4, ce qui redonne le résultat classique.

(VIII-42) est donc plus commode que (VIII-24).

– En reportant (IX-5) dans (VIII-42) puis dans (VIII-31), on obtient la section efficace de diffusion Rayleigh.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_a^{\text{Rayleigh}} = r_0^2 \, \frac{m^2}{e^4} \, \omega^4 \left(\vec{\varepsilon}\,' \overleftrightarrow{\chi}_a \vec{\varepsilon}\right)^2 \qquad (\text{IX-6})$$

Le fait que cette section efficace varie très vite avec ω est à l'origine du bleu du ciel. Les molécules de l'atmosphère ont des bandes d'absorption loin dans l'UV et diffusent beaucoup plus la partie bleue que la partie rouge du spectre visible de la lumière solaire.

b) <u>Diffusion inélastique : diffusion Raman</u> $\left(b \neq a, \; \omega' = \omega - \frac{E_a - E_b}{\hbar}\right)$

Des calculs analogues aux précédents donnent :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{ba}^{\text{Raman}} = r_0^2 \, \frac{m^2}{e^4} \, \omega \omega'^3 \left[\vec{\varepsilon}\,' \overleftrightarrow{\chi}_{ba}(\omega)\, \vec{\varepsilon}\right]^2 \qquad (\text{IX-7})$$

où $\overleftrightarrow{\chi}_{ba}$ est un tenseur polarisabilité relatif à la transition $a \to b$.

$$\chi^{ij}_{ba}(\omega) = e^2 \sum_{\alpha \alpha' c} \left[\frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{r}_{\alpha'})_{bc} (\vec{e}_j \cdot \vec{r}_\alpha)_{ca}}{E_a - E_c + \hbar\omega} + \frac{(\vec{e}_j \cdot \vec{r}_\alpha)_{bc} (\vec{e}_i \cdot \vec{r}_{\alpha'})_{ca}}{E_b - E_c - \hbar\omega} \right] \qquad (\text{IX-8})$$

Si $\hbar\omega \ll E_c - E_a$, $E_c - E_b$, on peut remplacer $\hbar\omega$ par 0 dans les 2 dénominateurs de IX-8

<u>Remarque</u>

La formule IX-3 pour l'absorption à 2 photons est beaucoup moins commode que IX-4.

Supposons par exemple $\hbar\omega$ et $\hbar\omega'$ très petit devant $E_c - E_a$ et $E_c - E_b$. Les 2 termes du crochet de IX-3 se compensent à l'ordre 0 en $\hbar\omega/(E_c - E_a)$ et $\hbar\omega'/(E_c - E_a)$ [c-f identité VIII-37 où le 1^er^ membre est nul puisque $\langle b | a \rangle = 0$]. Il faut pousser le développement jusqu'à l'ordre 2 inclus pour obtenir une expression non nulle, équivalente d'ailleurs à l'expression IX-4 où l'on néglige $\hbar\omega$ et $\hbar\omega'$ dans les dénominateurs.

En particulier, il peut être dangereux d'effectuer des approximations sur l'expression IX-3. Supposons par exemple que tous les niveaux relais c sont très éloignés de a et b et qu'il y en ait un, c_0, qui ait des forces d'oscillateur $f_{c_0 a}$ et $f_{c_0 b}$ très supérieures à toutes les autres (cf figure 9)

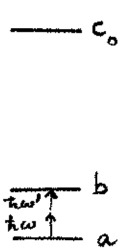


Fig 9

Il est alors très tentant de ne conserver que le terme c_0 dans IX-3 et de négliger $\hbar\omega$ et $\hbar\omega'$ dans les dénominateurs. On obtient ainsi

$$\sum_{\alpha'\alpha} \frac{1}{m} \left[\frac{(\vec{\varepsilon}\,' \cdot \vec{p}_{\alpha'})_{bc_0} (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_\alpha)_{c_0 a}}{E_a - E_{c_0}} + \frac{(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_\alpha)_{bc_0} (\vec{\varepsilon}\,' \cdot \vec{p}_{\alpha'})_{c_0 a}}{E_b - E_{c_0}} \right] \qquad (\text{IX-9})$$

Or, d'après ce que nous avons vu plus haut, la contribution de l'ensemble des autres niveaux c (calculée elle aussi à l'ordre 0 en $\hbar\omega/E_c - E_a$ et $\hbar\omega/E_b - E_c$) compense exactement IX-9.

La difficulté précédente tient au fait que les 2 termes de IX-9, tout en étant chacun très importants, se compensent en grande partie, de sorte que l'on ne peut ignorer la contribution des autres niveaux. On peut montrer par contre que l'approximation consistant à garder le seul niveau relais c_0 dans l'expression (IX-4) conduit à un résultat qui n'est plus absurde.

(cf : F.V. BUNKIN Soviet Physics JETP, <u>23</u>, 1121 (1966).)

(4) Diffusion résonnante, effet Photoélectrique.

- Lorsqu'on augmente progressivement $\hbar\omega$, on voit apparaître une augmentation spectaculaire de la section efficace de diffusion σ lorsque ω devient voisin de l'une des fréquences propres atomiques ω_{ca}. σ devient de l'ordre de λ_{ca}^2, où λ_{ca} est la longueur d'onde associée à la transition $c-a$. L'étude quantitative de ce phénomène nécessite d'aller plus loin dans la série des perturbations (il faut en fait resommer partiellement cette série). Nous reviendrons plus tard sur ce problème.

- Lorsque $\hbar\omega > E_I$, le photon incident peut photoioniser l'atome et disparaître. L'allure des variations de la section efficace de photoionisation en fonction de $\hbar\omega - E_I$ est représentée sur la figure 10

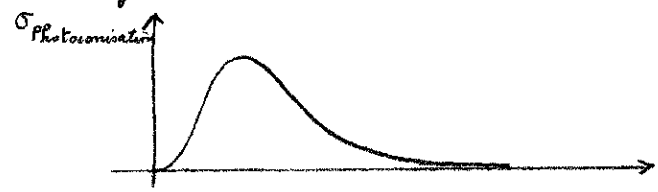


Figure 10

Lorsque $\hbar\omega \gg E_I$, σ_{Photo} décroît très vite, comme $\left(\frac{\hbar\omega - E_I}{E_I}\right)^{-7/2}$.

L'interprétation physique de cette décroissance rapide est simple. Quand $\hbar\omega \gg E_I$, l'électron apparaît de plus en plus libre pour le photon. Or on sait qu'un électron libre ne peut absorber réellement un photon, l'énergie et l'impulsion globales étant simultanément conservées au cours de ce processus. Voir par exemple la figure 11 a où on a représenté la relation entre énergie E et impulsion $\vec{p}$ pour un électron libre (parabole $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$) et pour un photon (droite $E = cp$ dont la pente c est pratiquement verticale lorsqu'on la compare à la pente des tangentes à la parabole qui vaut $P/m = v \ll c$ pour un électron non relativiste)

Un électron initialement immobile (point O) et absorbant un photon E, $p = \frac{E}{c}$ passe du point O au point O' de la figure 11-a. Il quitte la parabole. Cette transition ne peut donc être réelle.

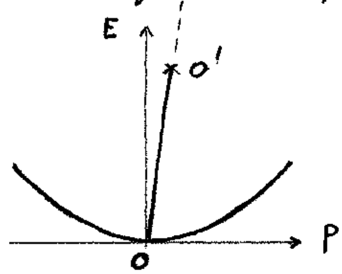


Fig 11 a

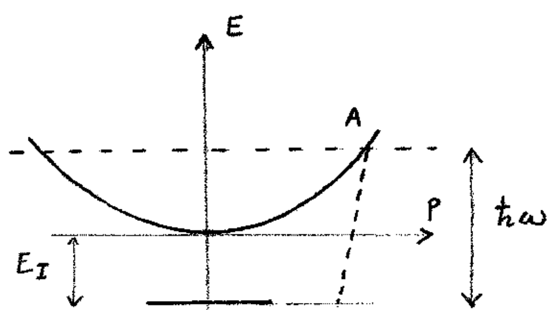


Fig 11 b

Lorsque l'électron est lié, son état fondamental peut être représenté schématiquement par un trait MN (cf figure 11 b), situé à une distance E_I au dessous de la parabole précédente qui représente maintenant le continuum des états d'énergie >0. La longueur de ce trait MN donne une idée de l'extension de la fonction d'onde de l'état fondamental dans l'espace des p (extension de l'ordre de $\hbar/a_0$). Si l'électron peut maintenant absorber <u>réellement</u> un photon $\hbar\omega$ et monter dans l'état schématisé par le point A, c'est qu'il a une amplitude de probabilité non nulle d'avoir une impulsion correspondant à celle du point K, intersection de MN avec la droite de pente c passant par A. Lorsque $\hbar\omega$ augmente, l'ordonnée et l'abscisse de A augmentent, K va de plus en plus loin dans la queue de la fonction d'onde de l'état fondamental en représentation $\vec{p}$ et c'est ce qui explique la décroissance très rapide de la section efficace de photoionisation (malgré l'augmentation de la densité d'états finals).

(5) Rayonnement incident de haute fréquence, mais de longueur d'onde grande devant les dimensions atomiques : $E_I \ll \hbar\omega < mc^2\alpha$

Comme on est toujours dans les conditions de validité de l'approximation dipolaire électrique (cf figure 8), on peut toujours utiliser VIII-24 ou VIII-42.

Comme par ailleurs $E_I \ll \hbar\omega$, on peut considérer que, dans les dénominateurs d'énergie de VIII-24 ou VIII-42, $\hbar\omega$ est très grand devant $E_c - E_a$ ou $E_b - E_a$. En effet, d'après la discussion du § 4 précédent, on sait que les seuls états c du continuum qui sont couplés de manière appréciable à l'état a par H_I sont ceux dont l'énergie E_c n'est pas trop supérieure à E_I. Par conséquent dans la sommation sur c qui figure dans VIII-24 ou VIII-42, les états c pour lesquels $E_c - E_a$ ne seraient pas négligeable devant $\hbar\omega$, et a fortiori devant E_I, interviennent avec un poids pratiquement nul et l'erreur commise en négligeant dans ces termes $E_c - E_a$ devant $\hbar\omega$ n'est pas importante.

a) Diffusion élastique : diffusion Thomson.

Si l'on fait $b = a$ et $\omega = \omega'$ dans VIII-24, et si l'on néglige $E_a - E_c$ devant $\hbar\omega$ dans les dénominateurs d'énergie du crochet de VIII-24, on voit que les 2 termes de ce crochet se compensent exactement : ils se réduisent en effet à $\frac{1}{m}\frac{1}{\hbar\omega}\left[\sum_{\alpha'} \vec{\varepsilon}\,'.\vec{p}_{\alpha'}, \sum_{\alpha} \vec{\varepsilon}.\vec{p}_{\alpha}\right]_{aa} = 0$ car les $\vec{p}_\alpha$ commutent.
C'est le 1er terme de VIII-24, $Z\,\vec{\varepsilon}\,'.\vec{\varepsilon}$, qui est alors important. Rappelons que ce terme provient de $H_{I2} = \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2$ (Terme à 2 photons de l'hamiltonien d'interaction).

La même manipulation effectuée sur VIII-42 montre par contre que VIII-42 est nul à l'ordre 0 en $E_c - E_a/\hbar\omega$. Il faut pousser le développement jusqu'à l'ordre 2 en $E_c - E_a/\hbar\omega$ pour obtenir une quantité non nulle, qui n'est d'ailleurs autre que $Z\,\vec{\varepsilon}\,'.\vec{\varepsilon}$.

<u>Conclusion</u> : Alors que pour des énergies de photons faibles devant les énergies atomiques, il est plus commode d'utiliser l'hamiltonien d'interaction $-e\vec{r}.\vec{E}$, pour des énergies de photon grandes devant les énergies atomiques il devient préférable d'utiliser l'hamiltonien $-\frac{e}{2m}\vec{p}.\vec{A} + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2$, le 2ème terme $\frac{e^2}{2m}\vec{A}^2$ devenant d'ailleurs le terme prépondérant.

Lorsqu'on remplace $\mathcal{C}$ par $Z\,\vec{\varepsilon}\,'.\vec{\varepsilon}$ dans (VIII,31), on obtient

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{\text{Thomson}} = Z^2 r_0^2 (\vec{\varepsilon}\,'.\vec{\varepsilon})^2 \qquad (IX-10)$$

(qui coïncide avec la section efficace d'un électron classique libre).

<u>Remarques</u>
(i) σ varie comme Z^2 parce que tous les électrons atomiques sont dans un volume de dimension linéaire a_0 petite devant la longueur d'onde du rayonnement

incident . leurs mouvements forcés sous l'influence de ce rayonnement sont donc en phase ; l'amplitude diffusé varie par suite en Z et la section efficace en Z^2.

(ii) Si dans (VIII-24), on pousse le développement du $2^{ème}$ terme à l'ordre 1 en $(E_c-E_a)/\hbar\omega$, on obtient un terme correctif qui s'écrit :

$$\frac{1}{m}\ \frac{1}{\hbar^2\omega^2}\sum_c\Big[\sum_{\alpha'}(\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{P}_{\alpha'})_{ac}\sum_\alpha(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{P}_\alpha)_{ca}(E_c-E_a)-\sum_\alpha(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{P}_\alpha)_{ac}(E_a-E_c)\sum_{\alpha'}(\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{P}_{\alpha'})_{ca}\Big]$$

$$=-\frac{1}{m}\ \frac{1}{\hbar^2\omega^2}\Big[\sum_{\alpha'}\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{P}_{\alpha'},\Big[\sum_\alpha\vec{\varepsilon}\cdot\vec{P}_\alpha\,,\,H_{at}\Big]\Big]_{aa}=\frac{1}{m\omega^2}\Big(\sum_{\alpha,\alpha'}(\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}_{\alpha'}})(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}_\alpha})\,V\Big)_{aa} \qquad (IX-11)$$

où V est l'énergie potentielle électrostatique de l'atome.

(IX-11) représente une correction d'état lié à la diffusion Thomson. Le mouvement forcé d'un électron sous l'effet du rayonnement incident n'est pas tout à fait celui d'un électron libre. Il est légèrement perturbé par suite de l'interaction électrostatique avec le noyau et les autres électrons.

b) Diffusion inélastique : diffusion Raman.

Comme $b\neq a$, le 1^{er} terme de VIII-24 est nul. Le $2^{ème}$ terme est nul à l'ordre 0 en $(E_c-E_a)/\hbar\omega$ et donne à l'ordre 1 une petite correction analogue à IX-11

Dans le domaine d'énergie envisagé dans ce §, la diffusion Raman reste toujours négligeable devant la diffusion Thomson

(6) Rayonnement de haute fréquence et de longueur d'onde petite devant les dimensions atomiques : $\alpha mc^2 \ll \hbar\omega < mc^2$. Diffusion Compton :

Comme nous supposons $\hbar\omega < mc^2$, nous continuerons à utiliser des formules établies à partir d'un traitement non relativiste de l'électron. Ces formules deviennent cependant de moins en moins valables lorsque $\hbar\omega$ se rapproche de mc^2.

Comme la longueur d'onde est petite devant a_0, l'approximation dipolaire électrique n'est plus valable et on ne peut plus utiliser VIII-24 ou VIII-42. Il faut revenir à VIII-22.

Comparons la $1^{ère}$ ligne et la $2^{ème}$ ligne de VIII-22. A l'ordre 0 en $(E_c-E_a)/\hbar\omega$, on met aisément la $2^{ème}$ ligne sous la forme de l'élément de matrice d'un commutateur

$$\frac{1}{m\hbar\omega}\sum_\alpha\Big[\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{P}_\alpha\,e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_\alpha}\,,\,\vec{\varepsilon}\cdot\vec{P}_\alpha\,e^{i\vec{k}\,\vec{r}_\alpha}\Big]_{ba} \qquad (IX-12)$$

(Dans le § précédent, on remplaçait les exponentielles par 1 et on trouvait 0). (IX-12) se calcule sans difficulté. On trouve :

$$\frac{1}{m\omega}\langle b\,|\sum_\alpha\Big((\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{P}_\alpha)(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{k}')+(\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{k})(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{P}_\alpha)\Big)e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}_\alpha}\,|\,a\rangle \qquad (IX-13)$$

c'est à dire une quantité de l'ordre de $\frac{P}{m}\frac{k}{\omega}\sim\frac{v}{c}$ fois plus petite que la $1^{ère}$ ligne. Donc, que b soit égal à a ou différent de a, la $1^{ère}$ ligne de VIII-22 est prépondérante et nous prendrons donc

$$\mathcal{T}_{b\vec{k}'\vec{\varepsilon}',a\vec{k}\vec{\varepsilon}}=\vec{\varepsilon}'\cdot\vec{\varepsilon}\ \langle b|\,e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}\,|a\rangle \qquad (IX-14)$$

Pour simplifier, nous avons pris également un atome avec un seul électron.

$e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}$ est un opérateur de translation dans l'espace des $\vec{p}$. On voit donc que l'amplitude de transition $\mathcal{C}$ est proportionnelle au produit scalaire dans l'espace des $\vec{p}$ de la fonction d'onde associée à l'état final $|b\rangle$ par la fonction d'onde de l'état initial $|a\rangle$ translatée de $\hbar(\vec{k}-\vec{k}')$.

a) <u>Diffusion élastique Thomson</u>

Le recouvrement entre la fonction d'onde $\varphi_a(\vec{p})$ et la même fonction d'onde translatée diminue quand $|\vec{k}-\vec{k}'|$ augmente. Donc, l'intensité de la raie Thomson décroît.

<u>Remarque</u>. Revenons à un atome à plusieurs électrons. On peut écrire :

$$\langle a|\sum_\alpha e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}_\alpha}|a\rangle = \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} \underbrace{\sum_\alpha \langle a|\sum_\alpha \delta(\vec{r}-\vec{r}_\alpha)|a\rangle}_{\rho_a(\vec{r})} \, d^3r \qquad (IX-15)$$

On reconnait au 2ème membre la densité électronique $\rho_a(\vec{r})$ de l'atome dans l'état a. En étudiant la répartition angulaire de la raie diffusée élastiquement, on obtient donc la T.F. de $\rho_a(\vec{r})$ et on peut par suite remonter à $\rho_a(\vec{r})$.

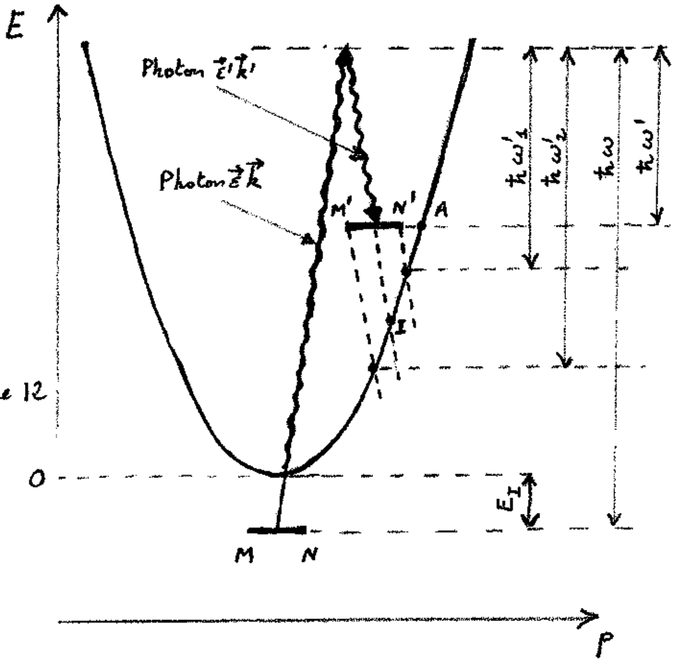
b) <u>Diffusion inélastique Raman avec état atomique final discret.</u>

$\varphi_a(\vec{p})$ et $\varphi_b(\vec{p})$ sont des fonctions d'onde orthogonales. Elles ne le sont plus quand on translate $\varphi_a(\vec{p})$ de $\hbar(\vec{k}-\vec{k}')$. Les raies Raman discrètes augmentent donc d'intensité quand ω augmente, puis elles disparaissent quand ω est suffisamment grand pour que $\varphi_a[\vec{p}+\hbar(\vec{k}-\vec{k}')]$ et $\varphi_b(\vec{p})$ ne se recouvrent plus.

c) <u>Diffusion inélastique Raman avec état atomique final dans le continuum. Diffusion Compton.</u>

Afin de pouvoir raisonner sur des figures à 2 dimensions (énergies en ordonnées, impulsions en abscisses), nous allons nous limiter à la diffusion vers l'arrière (les idées physiques demeurant les mêmes dans le cas général)

Figure 12



Comme sur la figure 11b, l'état fondamental a est représenté par un trait MN (de longueur $\sim \frac{\hbar}{a_0}$) situé à une distance E_I au dessous de la parabole qui schématise le continuum d'énergie > 0.

Après absorption du photon $\vec{\varepsilon}\vec{k}$ et réémission du photon $\vec{\varepsilon}'\vec{k}'$, la fonction d'onde de a est translatée et est schématisée par le trait M'N'. L'amplitude de transition est proportionnelle au produit scalaire de cette fonction d'onde translatée avec celle de l'état du continuum qui a pour énergie $-E_I+\hbar\omega-\hbar\omega'$ (même ordonnée que le segment M'N'). La fonction d'onde de cet état peut être approximée par une fonction $\delta(p-p_0)$ où p_0 est l'abscisse du point A, intersection de M'N' avec la parabole :

Si l'on fixe $\hbar\omega$ et que l'on fait varier $\hbar\omega'$, on voit clairement sur la figure 12 que cette amplitude sera grande lorsque A sera à l'intérieur du segment M'N', c-à-d pour $\omega'_1 \lesssim \omega' \lesssim \omega'_2$ où ω'_1 et ω'_2 sont définis par les intersections avec la parabole des droites de pente $-c$ passant par N' et M'. (cf figure 12). On voit donc que la seule diffusion importante dans ce cas correspond à une diffusion Raman avec état final dans le continuum (le recouvrement de la fonction d'onde translatée avec les états du spectre discret, y compris l'état fondamental est trop petit). Le centre de cette raie correspond à l'ordonnée du point I de la figure 12.

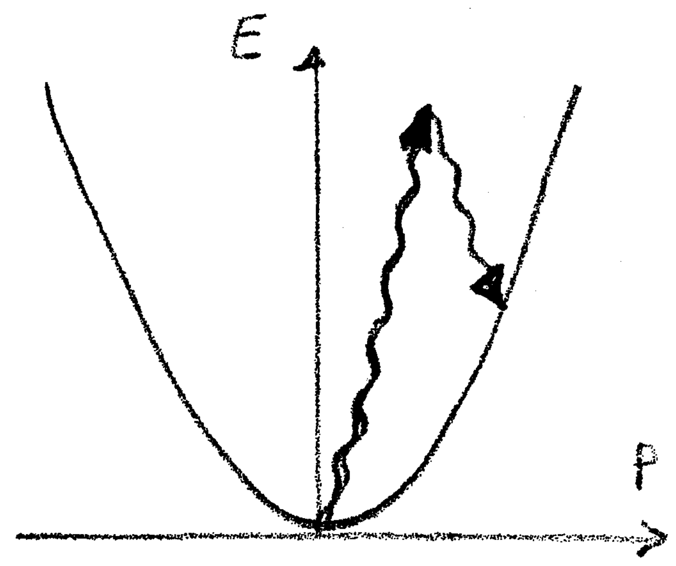


Figure 13

Cette raie n'est autre que la raie Compton d'un électron atomique. La fréquence de la raie diffusée s'obtient en effet en écrivant la conservation de l'énergie et de l'impulsion au cours du processus de diffusion.

Si l'on avait un électron libre initialement au repos, l'équivalent de la figure 12 serait la figure 13. Le fait que l'électron soit lié entraîne une légère correction sur la fréquence des photons émis (due à l'écart E_I entre MN et la parabole) et une certaine largeur de la raie Compton (due à l'incertitude en impulsion de l'état initial de l'électron).

Remarques :

(i) On peut comprendre intuitivement comment on passe, en augmentant l'énergie des photons incident, d'une diffusion élastique Thomson à une diffusion inélastique Compton.

Dans les 2 cas, l'énergie du photon incident est grande devant l'énergie de liaison de l'électron atomique, E_I.

Dans le 1er cas (diffusion Thomson prépondérante), l'énergie de recul que l'électron encaisserait en diffusant inélastiquement le photon, énergie qui est de l'ordre de $\hbar^2\omega^2/mc^2$, est petite devant E_I.

$$\hbar^2\omega^2/mc^2 \ll E_I \qquad (IX-16)$$

Comme $E_I \sim \alpha^2 mc^2$, on retrouve bien $\hbar\omega \ll mc^2\alpha$ qui est la condition de validité du § 5 (il y a donc équivalence entre les conditions : longueur d'onde grande devant les dimensions atomiques et énergie de recul de l'électron petite devant son energie de liaison). Dans ce cas, l'électron est trop bien lié au noyau pour encaisser tout seul l'énergie de recul. C'est l'atome qui recule dans son ensemble ce qui se traduit par un déplacement de frequence $\omega\,\hbar\omega/Mc^2$ (où M est la masse de l'atome) négligeable. La diffusion est élastique.

Dans le 2ème cas au contraire $\hbar^2\omega^2/mc^2 \gg E_I$. La liaison de l'électron est trop "molle" pour empêcher l'électron de reculer tout seul et d'emporter ainsi sous forme d'énergie cinétique une partie de l'energie du photon incident. La diffusion est inélastique.

Les effets précédents rappellent par certains côté l'effet Mössbauer.

(ii) Lorsque $\hbar\omega \gtrsim mc^2$, le traitement précédent n'est évidemment plus valable. Les effets relativistes deviennent importants. La théorie correcte de la diffusion Compton repose sur l'électrodynamique quantique relativiste (formule de Klein-Nishina).

Lorsque $\hbar\omega > 2mc^2$, un nouveau phénomène apparaît : la création de paires électron-positron dans le champ coulombien du noyau.