

STAGE DE MASTER 2
PHYSIQUE STATISTIQUE ET PHÉNOMÈNES NON LINÉAIRES

ENS LYON

**Modélisation de la localisation faible et forte
dans une géométrie confinée**

Sébastien KAWKA

Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés

Directeurs de stage : Bart VAN TIGGELEN et Sergey SKIPETROV

Avril-Juillet 2006

Remerciements

Mon stage s'est déroulé au sein du Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés (LPMMC), dans l'équipe « Ondes en Milieux Complexes » sous la direction de Bart VAN TIGGELEN et Sergey SKIPETROV. Je tiens à les remercier pour les discussions fructueuses, leur patience et la confiance qu'ils m'ont accordée. Je les remercie aussi particulièrement de m'avoir convié à l'école de physique « Imaging, Communication, and Disorder », à Cargèse. Cela a été très formateur et enrichissant. Enfin, je remercie l'ensemble des membres du laboratoire pour leur accueil chaleureux et leur bonne humeur, et plus particulièrement Sébastien LABARTHE, Timothée KOURIBA et Nicolas DIDIER avec qui j'ai partagé le bureau. Mon travail a été très intéressant et ils ont tous contribué à le rendre agréable.

Table des matières

Remerciements	i
Introduction	1
1 Une idée de la localisation	2
1.1 Une image intuitive	2
1.2 Modèle d'Anderson	2
1.3 Critères de localisation	3
1.3.1 Critère de Ioffe-Regel	3
1.3.2 Critère de Thouless	4
1.4 Théorie d'échelle	4
1.5 Théorie autocohérente de la localisation	6
2 Localisation en milieux finis	7
2.1 Prise en compte des bords	7
2.2 Aspect expérimental	8
2.3 Localisation en 3 dimension : cas de la sphère	10
3 Etude numérique en géométrie sphérique	11
3.1 Méthode utilisée	11
3.2 Cas stationnaire	11
3.2.1 Coefficient de diffusion	11
3.2.2 Influence des conditions aux bords	12
3.2.3 Valeur au seuil de localisation	13
3.3 Aspects dynamiques	13
3.3.1 La bonne observable : pôles de diffusion	14
3.3.2 Influence de la renormalisation	16
3.3.3 Variation avec la taille de la Sphère	16
3.3.4 Evolution avec le produit $k\ell$	16
3.3.5 Bilan	18
Conclusion et perspectives	19
Bibliographie	20
A Décomposition en fonctions propres	21
A.1 Adimensionnalisation des équations	21
A.2 Décomposition en harmoniques sphériques	22
A.3 Equations des fonctions propres	23
B Calcul de la fonction de Green	24
C Code numérique	25

Introduction

La localisation est un phénomène qui peut apparaître lorsqu’une onde se propage dans un milieu désordonné. Par milieu désordonné on entend un milieu inhomogène où les hétérogénéités sont réparties de façon aléatoire. Ce phénomène a été découvert par Anderson en 1958 pour expliquer la transition métal-isolant [1]. Il est de nature purement ondulatoire, les ondes pouvant être des ondes de matière, comme des électrons qui sont à l’origine de cette description, mais aussi des ondes lumineuses ou acoustiques. Cette idée de la localisation a eu des répercussions dans des domaines variés comme pour le transport radiatif, la sismologie, la physique atomique qui en sont quelques exemples. Cette approche a initié une nouvelle physique mésoscopique, qui a permis la découverte de phénomènes nouveaux tels que la rétrodiffusion cohérente, la localisation faible, les fluctuations universelles de conductance, etc. Cela a ouvert aussi les portes d’une physique des ondes en milieu désordonné très riche (voir [2]) avec des applications concrètes actuelles dans de nombreux domaines concernant entre autres les télécommunications, l’acoustique sous-marine, les atomes froids ou encore l’imagerie médicale.

Nous nous intéresserons ici plus particulièrement à la propagation de la lumière dans un milieu désordonné quelconque. Dans ces milieux la lumière est multiple-ment diffusée par les hétérogénéités et on perd l’idée de propagation balistique. C’est un phénomène rencontré quotidiennement : les nuages, le lait, le papier, sont des exemples pour lesquels il y a diffusion multiple. Pour ceux que l’on vient de citer, la diffusion est faible et le transport de la lumière est bien décrit par une approximation de diffusion [3] :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{D}\nabla^2\right)C(r, r', t) = \delta(r - r')\delta(t)$$

où \mathcal{D} est le coefficient de diffusion et C est la fonction de Green de cette équation de diffusion, c’est la solution lorsque la source est ponctuelle en r' et émet à $t = 0$. Cependant cette approche néglige les interférences et lorsque celles-ci deviennent prépondérantes la description « classique » en terme de diffusion n’est plus valable, on voit alors apparaître les effets de localisation.

La problématique que l’on se pose ici est de savoir quels sont les effets de la localisation dans une géométrie confinée. On utilisera pour y répondre un modèle numérique.

La première partie permet de se familiariser avec les concepts de la localisation. On partira d’une description simple pour comprendre le rôle des différentes grandeurs mises en jeu, puis on arrivera à l’équation autocohérente pour le coefficient de diffusion sur laquelle on basera notre travail. La seconde partie présente la physique propre au problème que l’on s’est posé : les avantages de la méthode, les observables et la géométrie choisie. Enfin, la troisième partie expose le travail effectué numériquement. Après une étude statique du coefficient de diffusion, on a abordé les aspects dynamiques, qui se rapportent aux résultats obtenus expérimentalement.

1 Une idée de la localisation

1.1 Une image intuitive

Les phénomènes de localisation ont tout d'abord été avancés dans les problèmes de transport d'électrons dans le but de comprendre la transition métal-isolant. En effet, dans un métal, à partir d'un certain seuil de désordre, de conducteur, où les électrons se déplacent par diffusion, le matériau devient isolant. La fonction d'onde des électrons passe d'un état spatialement étendu à un état spatialement localisé où elle décroît exponentiellement à partir d'une position donnée.

La définition la plus simple que l'on pourrait en déduire est, comme cela est suggéré par le titre de l'article d'Anderson [1], l'absence de diffusion :

$$\mathcal{D}(E) = 0 \tag{1}$$

où \mathcal{D} est le coefficient de diffusion pour un électron ou une onde d'énergie E . C'est une quantité globale, ce qui montre que la localisation n'est pas un effet dû à un quelconque état lié créé par un défaut ponctuel. D'après les mathématiciens, il y a localisation dans un certain intervalle d'énergie ΔE si pour « quasiment toute réalisation » $\{V\}$ du potentiel aléatoire V , l'Hamiltonien $H = H_0 + V$ a un spectre discret avec des fonctions propres exponentiellement localisées $\psi_n(r)$:

$$|\psi_n(r)| \leq C_n(V) \exp(-A|r - r_n(\{V\})|) \tag{2}$$

La différence avec un état lié est qu'il y a une infinité de valeurs propres dans l'intervalle ΔE .

Remarquons que ces définitions sont valables pour un milieu infini, nous verrons dans la suite ce qu'il en est pour un milieu de taille fini.

1.2 Modèle d'Anderson

Le modèle le plus simple qui montre les principales caractéristiques de la localisation est le modèle d'Anderson [1, 3]. Ce modèle décrit le saut d'un électron d'un site à l'autre d'un réseau désordonné. Le saut d'un site $|m\rangle$ à un site $|n\rangle$, en général premiers voisins, selon la dimension, est caractérisé par un terme cinétique t . Le désordre est introduit en prenant l'énergie ϵ_n de chaque site de façon aléatoire, suivant une distribution $P(\epsilon) = 1/W$ avec $-W/2 < \epsilon < W/2$. l'Hamiltonien s'écrit alors :

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + t \sum_{n,m} |n\rangle \langle m| \tag{3}$$

En dimension 1 (modèle soluble avec la théorie des matrices aléatoires [4]) et en dimension 2 on trouve qu'il y a toujours localisation au sens de la définition (2). En dimension 3 il apparaît une transition entre états étendus (*Metalliques*) et localisés (*Isolants*), lorsque le désordre W/t devient suffisamment important, ou si E/Zt est suffisamment proche au bord du spectre ($E = Zt$), cf Fig.(1).

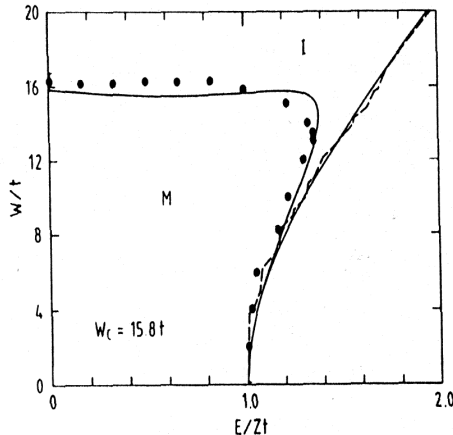


FIG. 1 – Diagramme de phase du modèle d’Anderson sur un réseau cubique en 3 dimensions, calculé avec différents modèles numériques [5].

Cette figure montre le diagramme de phase issue d’une simulation numérique du modèle appliqué à un réseau cubique simple. On voit que les états localisés apparaissent aux bord du spectre $E = \pm Zt$, puis s’étendent lorsque le désordre augmente, puis au delà d’un certain seuil W_c il n’y a plus d’états étendus.

1.3 Critères de localisation

Il est utile d’avoir des idées claires qui permettent de comprendre les principales caractéristiques de la localisation, restant valable pour des modèles plus compliqués. Les critères suivant aident à se forger une image simple.

1.3.1 Critère de Ioffe-Regel

Le libre parcours moyen ℓ est caractéristique des hétérogénéités du milieu, il représente la longueur moyenne parcourue pour une onde entre deux diffusions. Le libre parcours de transport ℓ^* est la longueur moyenne au bout de laquelle l’onde a perdu l’information sur sa direction initiale de propagation. Dans le cas de diffuseurs isotropes, auquel on se limitera ici, ces deux longueurs sont confondues s’il n’y a pas localisation. Un libre parcours moyen « grand » correspond à un milieu faiblement désordonné, la comparaison s’effectuant par rapport à la longueur d’onde $\lambda = 2\pi/k$ de l’onde se propageant dans le milieu. Lorsque le désordre est faible, le transport des ondes est bien décrit en moyenne par l’équation de diffusion. Mais que se passe-t-il lorsque le libre parcours moyen devient comparable à la longueur d’onde ? Dans ce cas les effets d’interférences ne sont plus négligeables et la description en terme de diffusion n’est plus valable. La localisation correspond à l’arrêt du transport dans un milieu diffusant à cause des interférences entre les ondes multiples diffusées. Ioffe et Regel ont proposé comme critère pour la

localisation en trois dimensions [6] :

$$k\ell < \text{cste} \approx 1 \quad (4)$$

Ce critère n'est pas universel dans le sens où la constante peut varier d'un modèle à l'autre, usuellement on se ramène à 1. Généralement bien vérifié dans les théories comme le modèle d'Anderson ou la théorie autocoherente, il est admis et utilisé comme un critère approximatif pour la localisation [7, 8, 9, 10].

1.3.2 Critère de Thouless

On considère un système désordonné de taille $L \gg \ell$, dans le régime étendu (= non localisé). Selon l'équation de diffusion, le temps caractéristique pour qu'une onde traverse le milieu est $t_D = L^2/\mathcal{D}$, où \mathcal{D} est le coefficient de diffusion. Par conséquent les états propres du système ont une largeur typique $\delta E \approx \mathcal{D}/L^2$, appelée énergie de Thouless. On peut comparer cette largeur avec l'écart moyen entre les niveaux ΔE donné approximativement par l'inverse de la densité d'états : $1/\rho(E)L^d$ où L^d est le volume du système qui a la dimensionalité d . On peut alors définir :

$$g \equiv \frac{\delta E}{\Delta E} \approx \rho(E)\mathcal{D}(E)L^{d-2} \quad (5)$$

La variable sans dimension g est appelée conductance réduite car pour un métal elle coïncide avec la conductance de Drude du milieu, à un facteur e^2/h près.

Selon Thouless [11], si $g > 1$ alors la diffusion peut être assurée par les microétats du système désordonné, ce dernier étant donc dans le régime métallique. Pour $g < 1$ il ne peut plus y avoir diffusion car il n'y a plus recouvrement entre les niveaux, l'écart moyen pour la diffusion δE ne contient qu'un seul microétat, le système se trouve alors dans le régime localisé. Le critère pour la localisation pour un milieu fini devient donc :

$$g < \text{cste} \approx 1 \quad (6)$$

On peut l'interpréter en terme de temps caractéristiques : t_D est le temps moyen mis par une excitation pour traverser le système en entier, alors que $\hbar/\Delta E$, appelé temps d'Heisenberg t_H , représente l'échelle de temps maximale possible dans le milieu, c'est le temps pour le visiter en entier. Il y a localisation lorsque le temps t_D excède le temps d'Heisenberg.

1.4 Théorie d'échelle

La théorie d'échelle est basée sur la dépendance de la conductance avec la taille du système. Classiquement, sans prendre en compte les interférences, la conductance moyenne d'un échantillon cylindrique, dépend de sa section transverse A et de sa longueur L selon :

$$g \sim \sigma(E)\frac{A}{L} = \rho(E)\mathcal{D}(E)L^{d-2} \quad (7)$$

σ est la conductivité, la seconde égalité étant valable pour un système de taille L dans chaque direction. Remarquons qu'en trois dimensions la conductance augmente avec la taille du système, alors que pour les dimensions inférieures à deux elle diminue. Rappelons-nous que l'on vient de voir (1.3.2) que si la conductance était suffisamment faible on peut atteindre la localisation. On peut donc entrer dans le régime localisé en augmentant la taille seulement en dimension un, où en effet on sait que tout les états le sont. En dimension trois, augmenter la taille ne favorise pas la localisation, sauf si on se trouve déjà dans ce régime, parce que $k\ell < 1$, dans ce cas on a :

$$g \sim \exp\left(-\frac{L}{\xi}\right) \quad (8)$$

On remarque que la dépendance par rapport à la taille du système, sa dérivée de la conductance en particulier, ne dépend que de la conductance elle-même. La théorie d'échelle suppose alors l'existence d'une longueur ξ , dépendante du degré d'hétérogénéité du système mais indépendante de sa taille L , telle que la conductance ne dépende que du rapport ξ/L

$$g = F\left(\frac{\xi}{L}\right) \quad (9)$$

cela implique l'existence d'une fonction ne dépendant que d'un paramètre [12] : la conductance réduite g :

$$\beta(g) = \frac{d \log g}{d \log L} \quad (10)$$

qui identifie g comme le paramètre caractéristique.

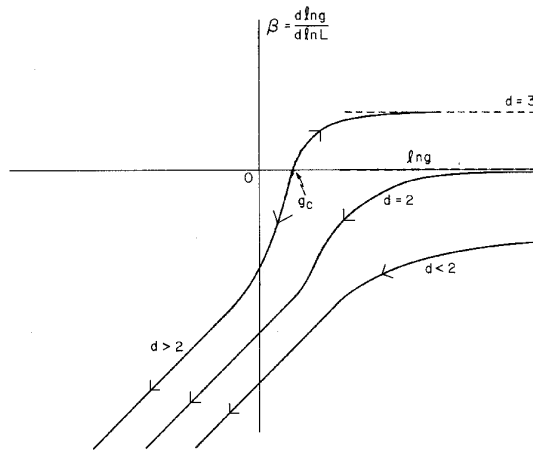


FIG. 2 – La fonction d'échelle $\beta(g)$ en fonction de $\log(g)$ en dimension 1,2 et 3. En dimension > 2 il existe un point critique défini comme un zéro de β . Les flèches indiquent la direction du flot de renormalisation lorsque la taille du système augmente.

La fonction $\beta(g)$ est supposée être continue, et des équations (7) et (4) on en déduit

les limites :

$$\beta(g) = \begin{cases} d - 2 - a/g & g \gg g_c \\ \log g + \text{cste} & g \ll g_c \end{cases} \quad (11)$$

Le terme a/g ($a > 0$) est une correction due à des effets de localisation faible qui peut se calculer à partir d'une théorie des perturbations.

En trois dimension cela établit l'existence d'un point critique instable g_c pour lequel la fonction β s'annule cf Fig.2, cette valeur est identifiée comme la valeur critique du critère de Thouless (6). Pour $g > g_c$, $\beta > 0$, la conductance augmente avec la taille du système, et ξ est interprétée comme une longueur de corrélation. Inversement si $g < g_c$, alors $\beta < 0$, la conductance diminue avec la taille, ξ est alors interprétée comme la longueur de localisation.

1.5 Théorie autocohérente de la localisation

La théorie autocohérente de la localisation est une théorie pour l'intensité moyenne et la constante de diffusion associée. En effet la théorie classique du transport prédit un transport diffusif dans un milieu désordonné. Les déviations engendrées par les effets d'interférences modifieront de façon quantitative ce comportement mais pas qualitativement (localement), on pourra donc toujours utiliser une description en terme de diffusion mais caractérisée par une constante de diffusion différente.

L'intensité est proportionnelle à l'amplitude du champ au carré : $I(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$. L'intensité moyenne, où la moyenne est prise sur les différentes réalisations du désordre, correspond à des chemins identiques pour la propagation des champs (cf Fig.3(a)). En effet la moyenne sur le désordre annule l'intensité correspondant à des chemins différents car il apparaît dans ce cas des différences de phase aléatoires se résultant à une perte de cohérence entre les deux trajectoires.

Un point clé de cette théorie est le principe de réciprocité : on ne change pas le signal reçu si l'on intervertit l'émetteur et le récepteur. L'intensité étant proportionnelle au carré du champs, on peut appliquer ce principe à un élément du champs seulement, cela décrit alors une propagation « en sens inverse » qui sera non nulle en moyenne. Pour une trajectoire d'un point à un autre, ce phénomène pourra se produire sur des trajectoires fermée, des boucles comme on peut voir sur la figure 3(b), ce qui réduit la diffusion. C'est la localisation faible.

Il est possible de prendre en compte cet effet de localisation faible en renormalisant la constante de diffusion, comme il a été démontré par Vollhardt et Wolffe en 1980. Puisque ces effets dépendent eux-même de cette constante, on obtient, [5], une équation autocohérente pour la constante de diffusion \mathcal{D} :

$$\frac{1}{\mathcal{D}(\omega)} = \frac{1}{D_B(\omega)} + \frac{C_d}{\rho(\omega)l} \int d^d q \frac{1}{\mathcal{D}(\omega)q^2} \quad (12)$$

où $D_B = cl/3$ avec c la célérité de l'onde, est le coefficient de diffusion classique, sans effet d'interférences. C_d est une constante dépendant de la dimension, $\rho(\omega)$ la

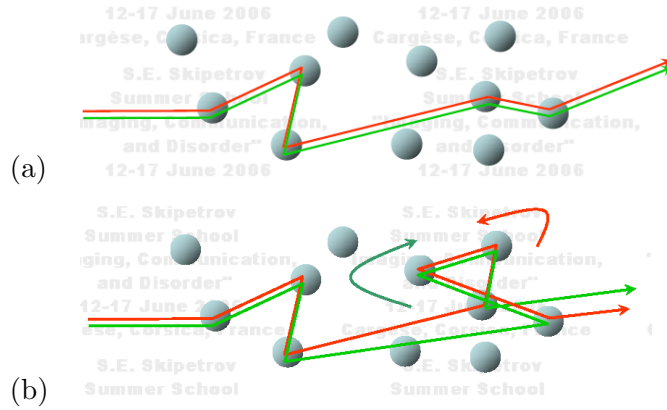


FIG. 3 – Diffusion des champs : contributions non nulles à la moyenne, les ronds bleus représentent les diffuseurs, les flèches la direction de propagation des champs. [13]

densité d'états par unité des volume et ℓ le libre parcours moyen. L'intégrale sur les nombres d'onde q vient du fait que l'on considère des boucles de localisation faible de toutes tailles, pour lesquelles le transport est diffus avec la même constante de diffusion \mathcal{D} .

Remarquons que pour $d \leq 2$, l'intégrale de la formule (12) diverge pour les petits nombres d'onde, pour lesquelles les approximations effectuées doivent être vérifiées, par conséquent cela conduit à $\mathcal{D} \rightarrow 0$ et donc à la localisation, au sens de la définition (1). En dimensions supérieures à 2, l'intégrale diverge pour les grands nombres d'onde, les hypothèses n'étant plus bien vérifiées à petite échelle, on impose alors une limite $q_{max} \approx 1/\ell$ où ℓ est le libre parcours moyen et correspond à la plus petite longueur caractéristique, cela revient à dire que l'équation de diffusion ne tiendra pas compte de la variation sur une échelle plus petite que le libre parcours moyen.

2 Localisation en milieux finis

2.1 Prise en compte des bords

La théorie précédente s'applique pour des milieux infinis, comment prendre en compte la taille finie des échantillons pour les expériences ? Le critère phénoménologique de Thouless permet de déterminer approximativement dans quels cas on pourra avoir ou non localisation, mais les questions que l'on doit se poser sont les suivantes. Comment décrire précisément les effets de la localisation dans une géométrie confinée ? Quelle est la conséquence de ces effets sur les mesures ?

L'idée ici est d'utiliser une version améliorée de la théorie autocohérente de Vollhardt et Wolfle [9], pour laquelle le coefficient de diffusion devient dépendant de la position :

$$[-i\Omega - \nabla \cdot \mathcal{D}(\mathbf{r}, \Omega) \nabla] C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (13)$$

$$\frac{1}{\mathcal{D}(\mathbf{r}, \Omega)} = \frac{1}{D_B} + \beta C(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \Omega) \quad (14)$$

L'équation (13) est l'équation de diffusion pour l'intensité, $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega)$ est la fonction de Green de cette équation et sa transformée de Fourier par rapport au temps $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ représente l'intensité en \mathbf{r}, t lorsque la source se trouve en $\mathbf{r}', t' = 0$. La seconde équation (14) relie le coefficient de diffusion à la probabilité de retour à l'origine $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \Omega)$, c'est l'équation autocohérente pour \mathcal{D} , équivalent de (12). Le coefficient β devant C est $\beta = 12\pi/k^2\ell$. La dépendance de la position en $\mathcal{D}(\mathbf{r}, \Omega)$ est à nouveau imposé par la réciprocity!

Ces deux équations couplées doivent être résolues en prenant compte des conditions aux bords « radiatives » du milieu :

$$C + z_0 \frac{\mathcal{D}}{D_B} \mathbf{n} \cdot \nabla C = 0 \quad (15)$$

\mathbf{n} est la normale sortante à la surface, z_0 est un paramètre caractérisant la réflexion interne, c'est-à-dire la difficulté à sortir du milieu. Typiquement, $z_0 \sim 1$ dans des conditions expérimentales réalistes. On appellera probabilité de fuite la probabilité pour qu'une onde sorte du milieu.

2.2 Aspect expérimental

Les expériences récentes pour l'étude de la localisation se concentrent sur la localisation de la lumière, la localisation des électrons dans les métaux ne pouvant apporter de preuve de l'effet purement d'interférences de la localisation. En effet, on ne peut distinguer un électron piégé dans un minimum local du potentiel aléatoire de celui piégé dans une boucle. L'avantage des photons par rapport aux électrons est leur grande longueur de cohérence, indépendante de la température (pas besoin de se placer à basse température), l'absence d'interaction photon-photon et la faiblesse des interactions photon-phonon.

Les expériences sur la localisation de la lumière étudient la réflexion [8] ou la transmission stationnaire [7, 15] ou dynamique [10] de l'intensité à travers un milieu fortement diffusif. Ces échantillons sont constitués de réseau poreux ou poudre de particules réfractives (semi-conducteurs : *GaP*, *GaAs*, ou pigments de peinture blanche : *TiO₂*...) d'une taille caractéristique $\sim 100 \text{ nm}$, la taille totale étant de l'ordre d'une dizaine de micromètres de manière à être inférieure à la longueur d'absorption L_a du milieu. La valeur du produit $k\ell$ est déterminée par la largeur à mi-hauteur du cône de rétrodiffusion cohérente et le coefficient de diffusion D_B par le temps moyen de traversée de l'échantillon (temps de vol).

Remarquons que dans le cas stationnaire l'absorption à des effets similaires à ceux de la localisation : cela conduit aussi à une diminution exponentielle de l'intensité transmise en fonction de la longueur de l'échantillon ou à un arrondissement du cône de rétrodiffusion. Il est donc parfois difficile de distinguer les

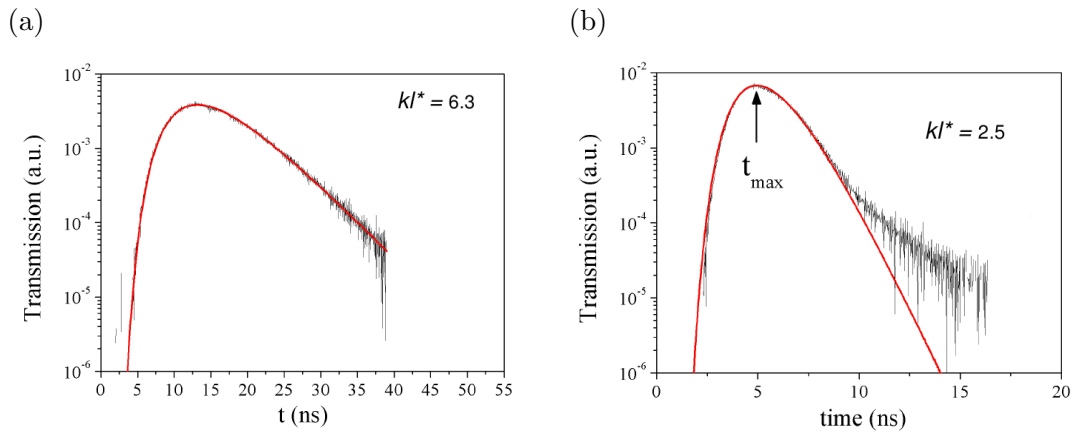


FIG. 4 – Expériences en transmission réalisé par M. Storzer et *al.* [10, 14], les courbes rouges sont la prédiction par la diffusion classique.

deux. Les expériences dynamiques sont les seules permettant de s'en affranchir, on s'intéressera à ce type de mesures. La figure 4 présente des résultats de l'expérience de M. Storzer et *al.* [10]. Un pulse lumineux (~ 20 ps) est envoyé sur l'échantillon de la géométrie d'une tranche, puis on mesure l'intensité transmise en fonction du temps. On voit clairement sur la figure (b) la déviation par rapport au modèle classique de la diffusion pour les temps longs lorsqu'on approche de la localisation.

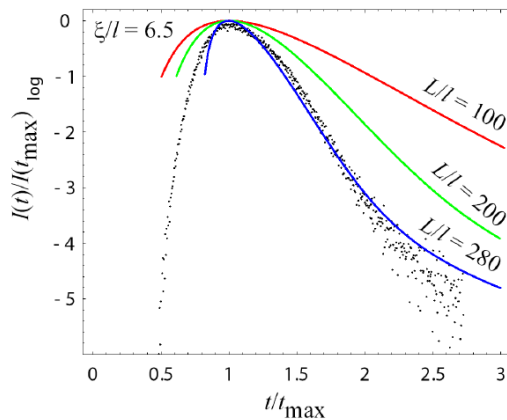


FIG. 5 – Expérience et simulation numérique : les points sont les données obtenues par G. Maret et *al.* [14], Les courbes pleines sont les simulations réalisées par S.E. Skipetrov.

Des simulations numériques récentes ont été réalisées par S.E. Skipetrov [9] pour une tranche en trois dimensions dans le régime localisé. Bien que la largeur maximale atteinte numériquement $L \sim 300l$ soit nettement inférieure à celle utilisée expérimentalement $\sim 10^4l$, on trouve un comportement similaire au temps long. L'investigation numérique doit donc se poursuivre mais ces premiers résultats sont encourageants.

2.3 Localisation en 3 dimension : cas de la sphère

Les études numériques précédentes ont été réalisées pour des milieux finis unidimensionnels ou infinis en deux dimensions. Dans le premier cas le comportement dépend de la conductance réduite g et il n'y a pas de transition, dans le second c'est le produit $k\ell$ qui est mis en avant. Mais le cas d'une géométrie totalement confinée en trois dimensions, où selon la théorie d'échelle il existe un point critique, est très peu connu. Le but est de comprendre les effets de taille finie sur la localisation et améliorer la descriptions des expériences. Dans un second temps il serait aussi d'étudier la possibilité de localisation forte des photons dans un condensat d'atomes froids. On s'intéressera au cas de la sphère car c'est la géométrie qui conserve le maximum de propriétés de symétrie. Dans ce cas, on décompose la fonction de Green sur les harmoniques sphériques :

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega) = \sum_{l,m} C_l(r, r', \Omega) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi)^* \quad (16)$$

où les C_l sont des coefficients indépendants de l'angle entre \mathbf{r} et \mathbf{r}' . Après adimensionnalisation des équations, cf annexe A, on obtient alors pour chaque coefficient :

$$\partial_r(r^2 d \partial_r C_l) + (i\Omega r^2 - l(l+1)d)C_l = -\delta(r - r') \quad (17)$$

où $d = d(r, \Omega)$ et $C_l = C_l(r, r', \Omega)$. Au centre il ne doit pas y avoir de divergence, donc $C|_{r=0}$ doit être borné (pas d'énergie infinie). Aux bords on impose la condition mixte $C + z_0 d(r, \Omega) \partial_r C|_{r=R} = 0$. Dans ce cas l'équation (14) pour le coefficient de diffusion devient :

$$\frac{1}{d(r, \Omega)} = 1 + \frac{3}{k^2 \ell} \sum_l (2l+1) C_l(r, r, \Omega) \quad (18)$$

Un point important est la façon de traiter la divergence dans cette dernière somme sur l . On a vu, cf 1.5, qu'on ne considère pas de variation sur une distance inférieure au libre parcours moyen, cela revient à ne pas considérer de variation angulaire pour un angle inférieur à $\ell/2\pi r$ lorsqu'on considère la probabilité de retour à l'origine $C(r, r, \Omega)$. Par conséquent on sommerait sur les valeurs de l telles que $l \leq \mu r/\ell$, où μ est un paramètre ajustable de façon à se ramener à la valeur de référence $k\ell = 1$ à la transition. De cette façon l'équation (18) conduit à un coefficient de diffusion discontinu en fonction de r . Pour rétablir la continuité spatiale on ajoute la contribution du dernier terme de façon proportionnelle à r/l , si on appelle l_{max} la partie entière de $\mu r/\ell$:

$$\frac{1}{d} = 1 + \frac{3}{k^2 \ell} \left[\sum_{l=0}^{l_{max}-1} (2l+1) C_l + \left(\mu \frac{r}{\ell} - l_{max}\right) (2l_{max}+1) C_{l_{max}} \right] \quad (19)$$

3 Etude numérique en géométrie sphérique

3.1 Méthode utilisée

J'ai réalisé un programme en Fortran 77 dont le but est la résolution de manière itérative des équations (17) et (18) -cf. annexe C. On utilise en première itération la valeur du coefficient de diffusion d pour un milieu infini et $\Omega = 0$: $d = 1 - \frac{1}{(kl)^2}$, que l'on reporte dans l'équation (17), le calcul des coefficients C_l permet alors de trouver une nouvelle fonction $d(r, \Omega)$, et on itère l'opération. En pratique on calcule les fonctions propres $\{f_+, f_-\}$ de cette équation, normalisées par celles obtenues pour $\Omega = 0$ et d constant pour éviter les problème de divergence (cf annexe A). Le schéma d'intégration s'effectue à l'aide d'un algorithme de Runge-Kutta d'ordre 4. La solution de (17) est alors donnée par

$$C_l(r, r', \Omega) = \frac{f_+(r_{<})f_-(r_{>})}{W} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} + Af_+(r)f_+(r')r^l r'^l \quad (20)$$

où $r_{<(>) } = \min(\max)\{r, r'\}$, W est le wronskien de l'équation différentielle et A une constante qui dépend des conditions aux bords.

3.2 Cas stationnaire

3.2.1 Coefficient de diffusion

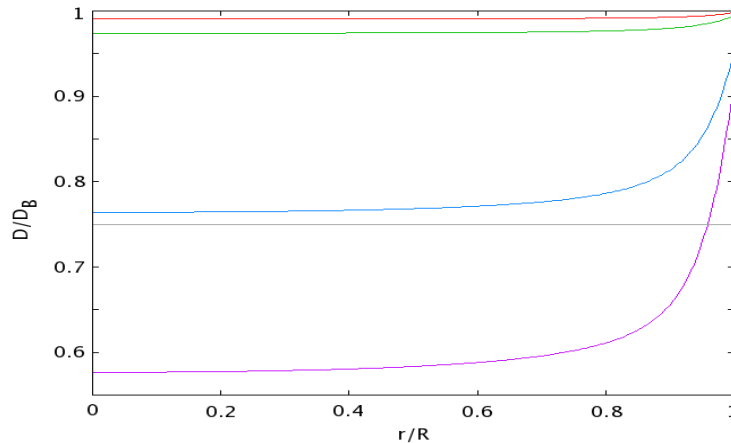


FIG. 6 – Coefficient de diffusion en fonction de la position, pour une sphère de rayon $R = 50l$ et pour différentes valeurs du produit kl : $kl = 10$, en rouge ; $kl = 6$, en vert ; $kl = 2$, en bleu avec juste en dessous la valeur correspondant pour un milieu infini, en gris et en violet $kl = 1.5$.

On s'intéresse au coefficient de diffusion dans le cas où $\Omega = 0$, il est donné directement à partir des itérations précédentes, que l'on arrête à partir d'un critère de convergence, typiquement $Sup(|\frac{d_i - d_{i-1}}{d_i}|) \Big|_r \leq 10^{-4}$, où i est le nombre d'itérations.

La figure 6 représente ce coefficient en fonction de la coordonnée radiale. On voit tout de suite l'effet du bord qui augmente localement la valeur de d , cela vient du fait que l'onde diffusée a une probabilité de fuite plus importante (probabilité de sortir du milieu) près du bord, par conséquent les effets d'interférence y sont réduits par rapport au centre. Plus généralement, la valeur du coefficient de diffusion est supérieure à sa valeur dans un milieu infini, pour la même raison : la probabilité de fuite est non nulle. (droite tracée en gris correspondant à la valeur dans un milieu infini pour $k\ell = 2$, en bleu), et inférieure à 1 qui correspond à une diffusion sans interférences.

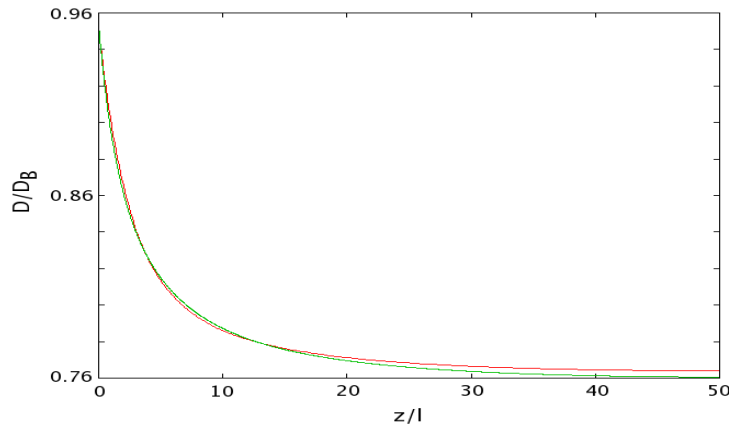


FIG. 7 – Coefficient de diffusion en fonction de la longueur de pénétration z ($= R - r$) en unité de libre parcours moyen, pour une sphère de diamètre $2R = 100\ell$ (en rouge) et une tranche d'épaisseur $L = 100\ell$ (en vert), $k\ell = 2$, $z_0 = \frac{2}{3}\ell$.

Il est intéressant de comparer le coefficient de diffusion pour une sphère de diamètre $2R = 100\ell$ à celui d'une tranche de même épaisseur, obtenu à partir du programme réalisé précédemment au laboratoire LPMMC par S.E.Skipetrov [9]. En effet dans la limite de grand rayon par rapport au libre parcours moyen, on doit retrouver sensiblement le même comportement près du bord que celui observé pour une tranche. On voit sur la figure 7 que l'on obtient un très bon accord entre les 2 calculs, bien que l'approche mathématique soit différente.

3.2.2 Influence des conditions aux bords

On peut regarder quelle est l'influence de la condition de bord sur le coefficient de diffusion, par exemple en faisant varier le paramètre z_0 (cf. 2.3). La valeur $z_0/\ell = 2/3$ correspond à la situation où il n'y a pas de réflexion interne [16], c'est la valeur que nous utilisons pour le reste de nos calculs. Une valeur plus élevée permet de prendre en compte la réflexion (z_0 augmente avec la réflexion interne), dans certaines expériences récentes, z_0/ℓ a été estimé de l'ordre de 10 [16, 7]. Une surface libre en élasticité (la terre...) peut être modélisée par $z_0 = \infty$.

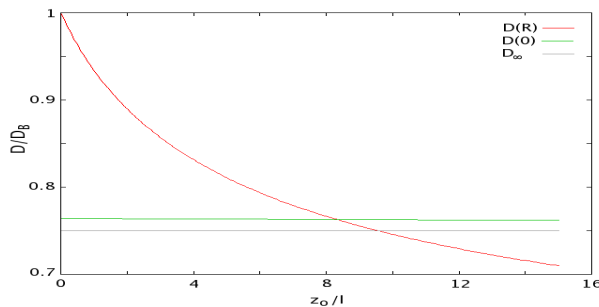


FIG. 8 – Coefficient de diffusion en fonction du paramètre z_0 caractérisant la condition de bord, pour une sphère de rayon $R = 50\ell$ et de produit $k\ell = 2$, en rouge : \mathcal{D} au bord, en vert : \mathcal{D} au centre, en gris : la valeur pour un milieu infini.

On observe, figure 8, que le coefficient de diffusion au bord décroît fortement avec z_0 , en effet plus la réflexion augmente, plus la probabilité de retour à l'origine pour une onde diffusée au bord est importante, cela revient à considérer une diffusion localement plus lente. La valeur au centre décroît légèrement, il en résulte qu'au delà d'une certaine valeur de z_0 ($z_0 \approx 8\ell$ ici), le coefficient de diffusion est plus faible au bord qu'au centre et par conséquent les phénomènes de localisation se produiront en premier lieu près de la surface, amplifiés par la réflexion interne.

3.2.3 Valeur au seuil de localisation

Dans un milieu infini le coefficient de diffusion varie avec le produit $k\ell$ comme $1 - 1/(k\ell)^2$, voir la courbe en bleu figure 9(a). Il s'annule donc lorsqu'on atteint la localisation $k\ell = 1$. Plus on s'approche de ce seuil de localisation, moins le programme réussit à converger (cf Fig.10), il faut donc extrapoler la valeur pour $k\ell = 1$. Si on trace \mathcal{D} au centre de la sphère en fonction de $k\ell$, on peut effectuer une regression, on trouve une correction par rapport à la valeur obtenu pour un milieu infini, Fig. 9(b), qui donne une variation en $1 - \text{cste}/(k\ell)^2$ avec $\text{cste} \simeq 0.94$, Fig. 9(a) en vert. Cela correspond à un coefficient de diffusion faible mais non nul au seuil de localisation, ce qui est attendu pour un milieu de taille finie, car la probabilité de fuite reste non nulle (cf 2.1).

3.3 Aspects dynamiques

Expérimentalement, les mesures effectuées sont des mesures sur la propagation des ondes à travers le milieu (cf. 2.2), on s'intéresse donc maintenant à la dépendance temporelle de la fonction de Green. Rappelons qu'il suffit ensuite de convoluer la fonction de Green par le terme source pour obtenir la réponse temporelle du milieu.

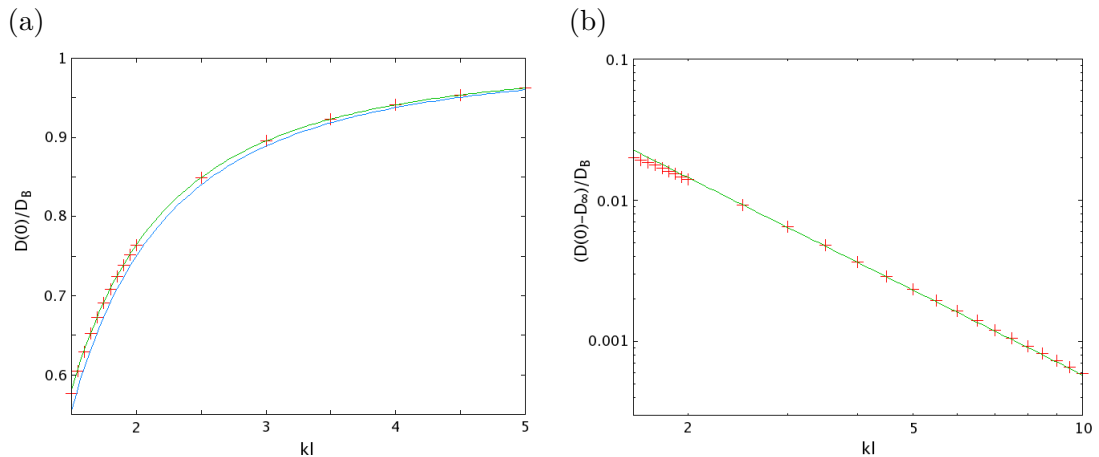


FIG. 9 – (a) Coefficient de diffusion au centre de la sphère en fonction du produit kl , pour $R = 50\ell$ et $\Omega = 0$; Les croix rouges sont les données numériques, en vert la courbe calculée, en bleu coefficient pour un milieu infini. (b) Différence avec la valeur pour un milieu infini, que l'on trouve de la forme $f(R)/(kl)^2$ où $f(R)$ dépend du rayon R et vaut 0.058 pour $R = 50\ell$

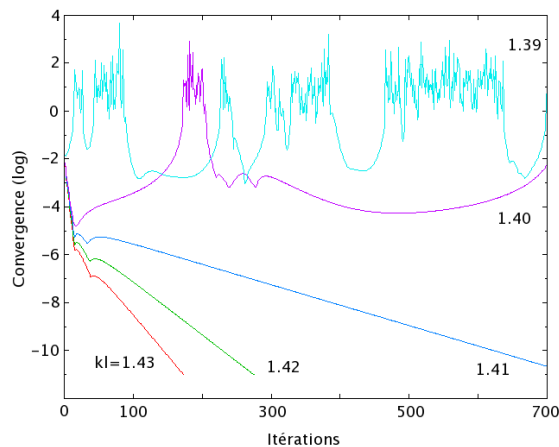


FIG. 10 – Convergence : $Sup(|\frac{d_i - d_{i-1}}{d_i}|)$, en fonction du nombre d'itérations lorsqu'on diminue le produit kl pour une sphère de rayon $R = 50\ell$. A partir de $kl \sim 1.4$ l'algorithme ne converge plus.

3.3.1 La bonne observable : pôles de diffusion

On revient à la fonction de Green dépendante du temps en faisant une transformée de Fourier inverse :

$$C(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathcal{R}} C(\mathbf{r}, \Omega) \exp(-i\Omega t) d\Omega \quad (21)$$

cependant cela nécessite de connaître $C(\mathbf{r}, \Omega)$ pour grand nombre de fréquences. On va voir que toute la dynamique est contenue dans les pôles de diffusion de la

solution et que seuls les premiers pôles sont importants. Regardons la solution de l'équation (13) dans un cas simple : $\mathcal{D} = cste$ et au bord $C(R) = 0$:

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega) = \sum_{l,n} \frac{j_l(k_{ln}r)j_l(k_{ln}r')}{-i\Omega + \mathcal{D}k_{ln}^2} f_l \quad (22)$$

où $\{j_l\}$ sont les fonctions de Bessels sphériques et f_l est une fonction angulaire (cf. annexe B pour le calcul). $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega)$ possède des pôles Ω_i en fréquence, on peut intégrer dans le plan complexe, avec $\Omega = \omega + i\alpha$, cf Fig.11 contour rouge, et appliquer le théorème des résidus :

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_{\Omega_i} \sum_{l,n} j_l(k_{ln}r)j_l(k_{ln}r') f_l \cdot i2\pi Res\left[\frac{\exp(-i\Omega t)}{-i\Omega + \mathcal{D}k_{ln}^2}, \Omega = \Omega_i\right] \quad (23)$$

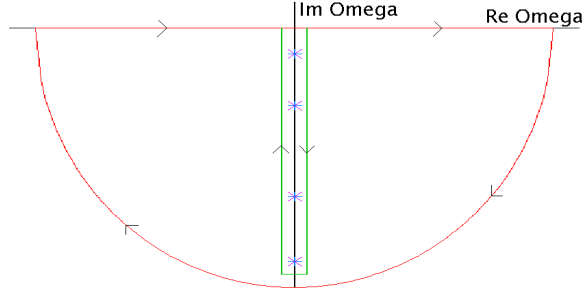


FIG. 11 – Fréquence dans le plan complexe, pôles et contours d'intégration

On voit que la dépendance temporelle ne dépend que des pôles. D'autre part, on remarque que ces pôles se trouvent uniquement sur le demi-axe imaginaire négatif, on peut donc effectuer l'intégration le long du contour vert, Fig.11, pour lequel on a :

$$C(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^0 C(\mathbf{r}, \Omega = 0^+ + i\alpha) \exp(\alpha t) d\alpha - \int_{-\infty}^0 C(\mathbf{r}, \Omega = 0^- + i\alpha) \exp(\alpha t) d\alpha \quad (24)$$

La partie réelle de $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega)$ est symétrique par rapport à ω et sa partie imaginaire antisymétrique, en notant $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \alpha) = \text{Im}(C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0^+ + i\alpha))$, il reste :

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = 2 \int_{-\infty}^0 P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \alpha) \exp(\alpha t) d\alpha \quad (25)$$

Par la suite on s'intéressera donc à la distribution $P(\alpha)$, en prenant $r' = 0$ et $r = R$, ce qui correspond à observer la réponse isotrope d'un pulse émis au centre de la sphère.

3.3.2 Influence de la renormalisation

Avec \mathcal{D} constante, la distribution $P(\alpha)$ définie ci-dessus est une somme de pics de Dirac. Lorsqu'on renormalise ce coefficient par les effets d'interférences, les pôles s'élargissent et deviennent des coupures de Riemann, cf Fig.???. La détermination de $P(\alpha)$ permettra de calculer les corrections de localisation faible à la propagation. On s'intéressera essentiellement à la position $\bar{\alpha}$ et à la largeur $\delta\alpha^2$ de ces pôles : $\bar{\alpha} = \int \alpha P(\alpha) d\alpha / \int P(\alpha) d\alpha$ et $\delta\alpha^2 = \int (\alpha - \bar{\alpha})^2 P(\alpha) d\alpha / \int P(\alpha) d\alpha$

On se limitera au premier pôle, ce qui correspond à une étude de la décroissance au temps long, cela est aussi suffisant pour voir les effets des différents paramètres en jeu.

3.3.3 Variation avec la taille de la Sphère

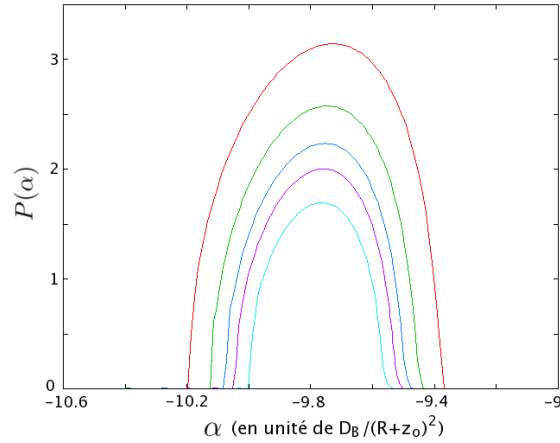


FIG. 12 – $P(\alpha)$ pour $R = 20\ell$ (en rouge), $30, 40, 50$ et 70ℓ (en bleu), $k\ell = 10$, dont on a renormalisé l'abscisse par le terme en $(1 + \frac{z_0}{R})^2$ provenant de la condition aux limites au bord.

On a étudié les effets de la taille de la sphère sur le premier pôle de diffusion, Fig.12. La position du pôle $\bar{\alpha}$ varie avec le rayon comme $A_1 / (1 + \frac{z_0}{R})^2$ cf Fig.13(a), où $A_1 = \text{cste} \simeq -9.77$. Cela est dû aux conditions aux limites qui reviennent à avoir l'annulation de la fonction de Green à une longueur z_0 après le bord, les pôles étant donnés par les zéros de la fonction $j_l(k_{ln}(R + z_0))$ au carré (cf. (36)), c'est donc purement un effet de dilatation. Nous prendrons en compte cette normalisation dans nos unités. La largeur du pôle varie en $1/R$, régression Fig.13(b). C'est-à-dire lorsque $R \rightarrow \infty$, il va y avoir recouvrement entre les différents pôles, on entre alors dans un régime différent (en effet la probabilité de fuite dans ce cas devient nulle).

3.3.4 Evolution avec le produit $k\ell$

On prend le rayon de la sphère constant ($R = 50\ell$), et on fait varier la longueur d'onde, donc le produit $k\ell$ (cf. 1.3.1). On voit très nettement sur la figure 14 le

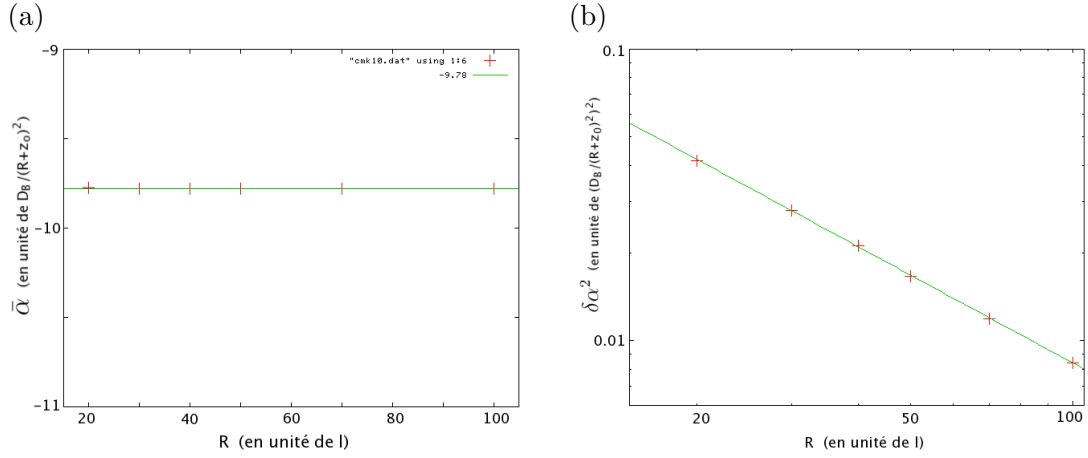


FIG. 13 – (a) Position du pôle en fonction du rayon, renormalisée par un terme $(1 + \frac{z_0}{R})^2$ qui provient de la condition au bord, on trouve une constante. (b) Largeur en fonction du rayon en échelle logarithmique, on observe une décroissance en $1/R$. Ici $k\ell = 10$

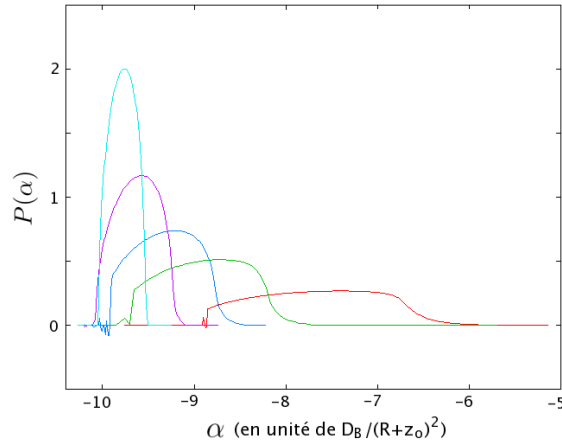


FIG. 14 – $P(\alpha)$ pour $k\ell = 10$ (en bleu), 6, 4, 3 et 2 (en rouge), $R = 50\ell$.

changement de forme du pôle : il s'élargit et s'aplatit. On trouve que la position varie comme $A_2(1 - \text{cste}'/(k\ell)^2)$ cf Fig.(15) premier cadre, où $A_2 = \text{cste} \simeq -\pi^2$ et $\text{cste}' \simeq 0.92$, cette dernière $\text{cste}' < 1$ montre qu'il y a encore décroissance temporelle du signal au seuil de localisation, ce qui est en accord avec 3.2.3. On trouve, régression Fig.(15), second cadre, que la largeur varie en $1/(k\ell)^2$. Par conséquent lorsque $k\ell \rightarrow \infty$, on retrouve un pic de largeur nulle qui correspond à la situation de diffusion simple, sans effet de localisation.

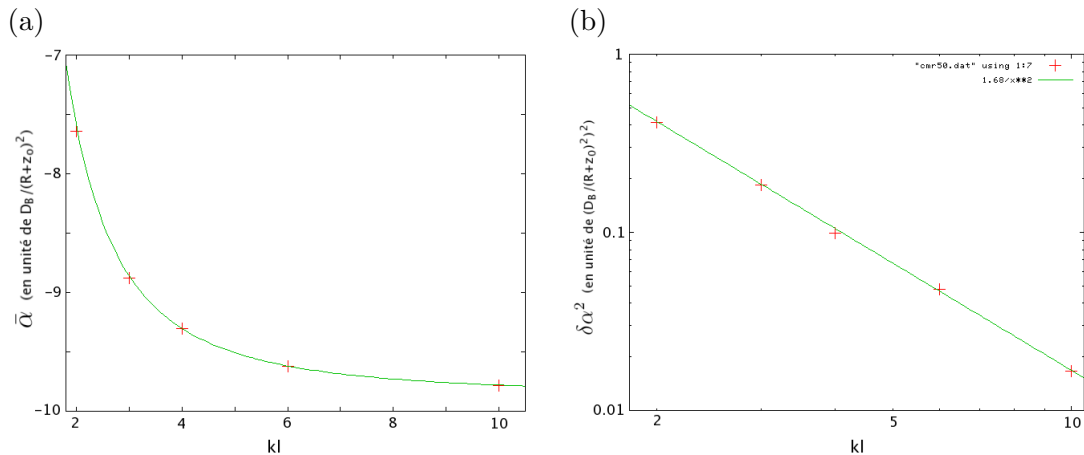


FIG. 15 – Position du pôle (a) et largeur (b) en fonction du produit $k\ell$ pour $R = 50\ell$, on trouve respectivement une loi en $\text{cste}(1 - \text{cste}'/(k\ell)^2)$ et $1/(k\ell)^2$.

3.3.5 Bilan

A l'aide des régressions précédentes on remarque que

$$\bar{\alpha} = -\pi^2 \left(1 - \frac{\text{cste}}{(k\ell)^2}\right) \quad \text{et} \quad \delta\alpha^2 \sim \frac{1}{(k\ell)^2} \frac{1}{R}, \quad (26)$$

en unité de $D_B/(R + z_0)^2$. Le facteur numérique π^2 dépend du pôle considéré et vient du zéro de la fonction de Bessel.

Cette dépendance rappelle celle observée dans le cas 1D (tube, section S , longueur L) [17], pour lequel $\delta\alpha^2 \sim 1/g = k^2 S \frac{\ell}{L}$. Calculons la conductance réduite (cf.1.3.2) pour la sphère : la densité d'état vaut $k^2/4\pi^2 c$, le volume $4\pi R^3/3$ d'où $t_H = k^2 R^3/3\pi c$, d'autre part $t_D = R^2/D_B$ avec $D_B = c\ell/3$, il suit :

$$\frac{1}{g} = 9\pi \frac{1}{(k\ell)^2} \frac{l}{R} \quad (27)$$

Pour la géométrie quasi-unidimensionnelle (tube) on avait : $\bar{\alpha} \sim (1 - \text{cste}/g)$ et $\delta\alpha^2 \sim 1/g$. Ici on retrouve $\delta\alpha^2 \sim 1/g$, alors que la position est déterminée par le produit $k\ell$ (et la condition aux limites), or la déviation par rapport à la diffusion classique vient justement de la largeur, $\propto 1/g$. On conclut alors que nos simulations sont en accords avec le critère phénoménologique de Thouless.

Conclusion et perspectives

L'objectif de ce stage a été d'investiguer les effets de la localisation dans une géométrie sphérique, par le biais de simulations numériques. Une géométrie confinée laissait entendre une absence de transition et un passage continu d'un régime étendu à un régime localisé. Nous avons donc utilisé une même description à partir de l'équation autocohérente pour la constante de diffusion, qui ne doit pas s'annuler, la probabilité de fuite n'étant jamais nulle. Une première étape, et non des moindre, a été la réalisation du code.

Nous avons pu ensuite réaliser une étude du coefficient de diffusion dans le cas stationnaire où l'on a mis en évidence l'effet des conditions aux bords. Nous n'avons pu obtenir de résultats pour la transition et au-dessous, l'algorithme ne convergeant pas vers ces valeurs, une amélioration du code est à prévoir utilisant des méthodes numériques plus précises. Une extrapolation des résultats montre comme attendu une valeur non nulle du coefficient de diffusion à la transition, cependant il faut améliorer la description pour pouvoir passer au-delà du seuil.

Nous nous sommes aussi intéressé à l'aspect dynamique qui concerne les corrections de localisation faible à l'intensité diffuse à travers un échantillon. Nous avons étudié pour cela les pôles de la fonction de Green de l'intensité, leur caractérisation permettant de connaître toute la dynamique. nous avons pu montrer la dépendance de leur position et de leur largeur en fonction des grandeurs caractéristiques : la conductance réduite g et le produit $k\ell$. Un certain nombre d'études restent à mener pour caractériser entièrement la dynamique, de plus cette approche ne semble plus valable en dessous de la transition où les « pôles » bien séparés se rejoignent et forment une coupure de Riemann continue. Là aussi une expérimentation numérique nécessite une amélioration du code.

Références

- [1] P.W.Anderson. Absence of diffusion in certain random latticies. *Physical Review*, 109, page 1492, March 1958.
- [2] P.Sebbah, editor. *Waves and Imaging through Complex Media*. Kluwer Academic Publishers, 2001.
- [3] E.Akkermans et G.Montambaux. *Physique mésoscopique des électrons et des photons*. CNRS éditions, 2004. ISBN : 2-271-06263-2.
- [4] C.W.J.Beenakker. Random-matrix theory of quantum transport. *Reviews of modern physics*, 69, page 731, July 1997.
- [5] D.Vollhardt and P.Wolfe. Selfconsistent theory of anderson localization. In Elsevier Science, editor, *Electronic Phase Transition*. Amsterdam, 1992.
- [6] A.F.Ioffe and A.R.Regel. Non-crystalline, amorphous and liquid electronic semiconductors. *Progress in Semiconductors*, 4,237, 1960.
- [7] D.S.Wiersma, P.Bartolini, A.Legendijk, and R.Righini. Localization of light in a disordered medium. *Nature*, 390, p.671, December 1997.
- [8] F.J.P.Shurmans, M.Megens, D.Vanmaekelbergh, and A.Legendijk. Light scattering near the localization transition in macroporous gap networks. *Physical Review Letters*, 83, 2183, September 1999.
- [9] S.E.Skipetrov and B.A.Van Tiggelen. Dynamics of anderson localization in open 3d media. *Physical Review Letters*, 96, 043902, February 2006.
- [10] M.Storzer, P.Gross, C.M.Aegerter, and G.Maret. Observation of the critical regime near anderson localization of light. *Physical Review Letters*, 96, 063904, February 2006.
- [11] D.J.Thouless. Electron in disordered systems and the theory of localization. *Physics Reports*, 13, n.3, p.93, 1974.
- [12] E.Abrahams, P.W.Anderson, D.C.Licciardello, and T.V.Ramakrishnan. Scaling théory of localization : Absence of quantum diffusion in two dimension. *Physical Review Letters*, 42, n.10, p.673, March 1979.
- [13] S.E.Skipetrov. Anderson localization of light. Conférence à l'école de physique du GDR IMCODE, June 2006.
- [14] G.Maret. Breakdown of photon transport due to anderson localization in 3d. Conférence à l'école de physique du GDR IMCODE, June 2006.
- [15] J.Gomez, R.Sprink, A.Legendijk, L.D.Noordam, and C.W.Rella. Static and dynamic transport of light close to the anderson localization transition. *Physical Review E*, 63, 046613, March 2001.
- [16] B.A.Van Tiggelen, A.Legendijk, and D.S.Wiersma. Reflection and transmission of waves near the localization treshold. *Physical Review Letters*, 84, 4333, March 2000.
- [17] S.E.Skipetrov and B.A.Van Tiggelen. Dynamics of weakly localized waves. *Physical Review Letters*, 92, 113901, March 2004.

A Décomposition en fonctions propres

A.1 Adimensionnalisation des équations

Il est utile de travailler avec des grandeurs sans dimension. A partir des équations (13) et (14) :

$$\begin{cases} [-i\Omega - \nabla \cdot \mathcal{D}(\mathbf{r}, \Omega)\nabla]C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \frac{1}{\mathcal{D}(\mathbf{r}, \Omega)} = \frac{1}{D_B} + \beta C(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \Omega) \end{cases}$$

on peut alors les réécrire :

$$\begin{cases} [-i\Omega \frac{R^2}{D_B} - R\nabla \cdot \frac{\mathcal{D}}{D_B} R\nabla](D_B RC) \frac{1}{R^3} = \frac{1}{R^3}(R^3\delta) \\ \frac{D_B}{\mathcal{D}} = 1 + \frac{\beta}{R}(D_B RC) \end{cases}$$

on prend R comme longueur caractéristique et R^2/D_B comme temps caractéristique, et on pose :

$$\begin{cases} \tilde{r} = \frac{r}{R} \quad , \quad \tilde{d} = \frac{\mathcal{D}}{D_B} \quad , \quad \tilde{\Omega} = \Omega \frac{R^2}{D_B} \quad , \quad \tilde{C} = (D_B RC) \quad , \quad \tilde{\delta} = R^3\delta \\ \tilde{\beta} = \frac{\beta}{R} = \frac{12\pi}{k^2\ell R} \quad , \quad \text{d'ou} \quad \tilde{\ell} = \frac{\ell}{R} \quad , \quad \tilde{k} = kR \quad \text{et} \quad \tilde{z}_0 = \frac{z_0}{R} \end{cases}$$

on obtient donc les équations avec grandeurs sans dimension, en omettant les tildes :

$$\begin{cases} [-i\Omega - \nabla \cdot d(\mathbf{r}, \Omega)\nabla]C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \frac{1}{d(\mathbf{r}, \Omega)} = 1 + \frac{12\pi}{k^2\ell} C(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \Omega) \end{cases} \quad (28)$$

avec la condition au bord :

$$C + z_0 d(\mathbf{n} \cdot \nabla C) = 0 \quad (29)$$

A.2 Décomposition en harmoniques sphériques

Pour utiliser au mieux les propriétés de symétrie, on décompose la fonction de Green sur les harmoniques sphériques (coordonnées sphériques) :

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega) = \sum_{l,m} C_l^m(r, r', \Omega) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi')^*$$

La réciprocité impose la symétrie entre la source r' et le détecteur r . On reporte dans l'équation (28), en développant et en multipliant par r^2 :

$$\begin{cases} \sum_{l,m} \mathcal{OD}[l] C_l^m Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi')^* = -\delta(r - r') \delta(\cos\theta - \cos\theta') \delta(\varphi - \varphi') \\ \frac{1}{d(r)} = 1 + \frac{12\pi}{k^2 \ell} \sum_{l,m} C_l^m(r, r, \Omega) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi')^* \end{cases}$$

où on a posé $\mathcal{OD}[l] = [-i\Omega r^2 - d(r)l(l+1) + \partial_r r^2 d(r) \partial_r]$, c'est un opérateur différentiel n'agissant que sur r . On projette alors sur la base des harmoniques sphériques en utilisant :

$$\langle Y_l^{m'}, Y_l^m \rangle = \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi Y_l^{m'}(\theta, \varphi)^* Y_l^m(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

on obtient :

$$\begin{cases} \mathcal{OD}[l] C_l^m Y_l^m(\theta', \varphi')^* = -\delta(r - r') Y_l^m(\theta', \varphi')^* \\ \frac{1}{d(r)} = 1 + \frac{12\pi}{k^2 \ell} \sum_{l,m} C_l^m(r, r, \Omega) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi')^* \end{cases}$$

On peut simplifier par $Y_l^m(\theta', \varphi')^*$ dans la première équation, on voit donc que C_l^m est indépendant de m , et sachant que $\sum_m Y_l^m(\theta, \varphi)^* Y_l^m(\theta, \varphi) = (2l+1)/4\pi$ il reste :

$$\begin{cases} \partial_r (r^2 d(r) \partial_r (C_l)) + (-i\Omega r^2 - d(r)l(l+1)) C_l = -\delta(r - r') \\ \frac{1}{d(r, \Omega)} = 1 + \frac{3}{k^2 \ell} \sum_{l,m} (2l+1) C_l(r, r, \Omega) \end{cases} \quad (30)$$

avec les conditions aux limites :

$$\begin{cases} \text{au centre} & C_l|_{r=0} < \infty \\ \text{au bord} & C_l + z_0 d(r, \Omega) \partial_r C_l|_{r=1} = 0 \end{cases} \quad (31)$$

A.3 Equations des fonctions propres

On recherche les solutions de la première équation de (30), qui admet pour $\Omega = 0$ deux fonctions propres $\tilde{f}_+ = r^l$ et $\tilde{f}_- = 1/r^{l+1}$. On cherchera donc à résoudre l'évolution des fonctions propres réduites f_+ et f_- pour Ω non nul, où on a posé dans ce cas $\tilde{f}_+ = f_+ r^l$ et $\tilde{f}_- = f_- / r^{l+1}$.

On peut réécrire (30) sous une forme matricielle $Y' = AY$, en posant :

$$Y = \begin{pmatrix} C_l \\ r^2 d(r) C_l' \end{pmatrix}, \quad Y' = \begin{pmatrix} C_l' = Y_2 / r^2 d \\ (-i\Omega r^2 - d(r)l(l+1)) Y_1 \end{pmatrix},$$

et

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1/r^2 d \\ (-i\Omega r^2 - d(r)l(l+1)) & 0 \end{pmatrix}$$

où Y' se réfère à la dérivée de Y par rapport à r . $W = \text{tr}[\tilde{Y}_+, \tilde{Y}_-]$ où $\tilde{Y}_{+/-}$ sont les fonctions propres, est le Wronskien associé à cette équation. Il vérifie $W' = \text{tr}[A]W = 0$, c'est donc une constante.

La solution $C_l(r, r', \Omega)$ est alors donnée par

$$C_l(r, r', \Omega) = \frac{f_+(r_{<})f_-(r_{>})}{W} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} + P f_+(r)f_+(r')r^l r'^l + Q f_-(r)f_-(r')/r^{l+1}r'^{l+1}$$

où $r_{<(>)} = \min(\max)\{r, r'\}$, P est une constante qui dépend des conditions aux bords, et $Q = \text{cte} = 0$ pour éviter la divergence non physique au centre.

En remplaçant f_+ et f_- dans (30), on trouve que ces fonctions vérifient $Y'_{+/-} = A_{+/-} Y_{+/-}$, avec

$$Y_{+/-} = \begin{pmatrix} f_{+/-} \\ r^2 d(r) f_{+/-}' \end{pmatrix}$$

et

$$A_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1/r^2 d \\ -(i\Omega r^2 + l r d'(r)) & -2l/r \end{pmatrix}, \quad A_- = \begin{pmatrix} 0 & 1/r^2 d \\ -(i\Omega r^2 + (l+1) r d'(r)) & 2(l+1)/r \end{pmatrix}$$

Ce sont ces deux équations que nous avons résolues numériquement.

B Calcul de la fonction de Green

On cherche la solution de l'équation (13) dans un cas simple : $\mathcal{D} = cste$ et au bord $C(R) = 0$:

$$[-i\Omega - \mathcal{D}\nabla^2]C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (32)$$

Dans un premier temps on recherche les fonctions propres de cette équation, soit à résoudre :

$$\nabla^2 C(\mathbf{r}) + k^2 C(\mathbf{r}) = 0 \quad , \quad C(r = R) = 0 \quad (33)$$

Ces fonctions sont les fonctions $C_{lmn}(\mathbf{r}) = j_l(k_{ln}r)Y_l^m(\theta, \varphi)$, où $\{j_l\}$ sont les fonctions de Bessels sphériques, et avec k_{ln} tel que $j_l(k_{ln}R) = 0$. On peut alors décomposer la fonction de Green $C(\mathbf{r})$ sur cette base de fonctions :

$$C(\mathbf{r}) = \sum_{l,m,n} A_{lmn} C_{lmn}(\mathbf{r})$$

Dans ce cas, d'après (33) :

$$\nabla^2 C(\mathbf{r}) = \sum_{l,m,n} A_{lmn} \nabla^2 C_{lmn}(\mathbf{r}) = - \sum_{l,m,n} A_{lmn} k_{ln}^2 C_{lmn}(\mathbf{r}) \quad (34)$$

d'où, en reportant dans (32) :

$$\sum_{l,m,n} A_{lmn} [-i\Omega + \mathcal{D}k_{ln}^2] C_{lmn}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

en multipliant les deux membres par $C_{l'm'n'}(\mathbf{r})$ puis en intégrant sur tout l'espace (les fonctions $\{C_{lmn}\}$ formant une base orthogonale), on en déduit :

$$A_{lmn} = \frac{C_{lmn}(\mathbf{r}')}{-i\Omega + \mathcal{D}k_{ln}^2}$$

d'où

$$\begin{aligned} C(\mathbf{r}) &= \sum_{l,m,n} \frac{C_{lmn}(\mathbf{r}) C_{lmn}(\mathbf{r}')}{-i\Omega + \mathcal{D}k_{ln}^2} \\ &= \sum_{l,n} \frac{j_l(k_{ln}r) j_l(k_{ln}r')}{-i\Omega + \mathcal{D}k_{ln}^2} \sum_m Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi') \end{aligned} \quad (35)$$

soit

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \Omega) = \sum_{l,n} \frac{j_l(k_{ln}r) j_l(k_{ln}r')}{-i\Omega + \mathcal{D}k_{ln}^2} f_l(\Delta\theta, \Delta\varphi) \quad (36)$$

où $f_l(\Delta\theta, \Delta\varphi) = f_l(\theta - \theta', \varphi - \varphi') = \sum_m Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi')$

C Code numérique

```

programme sphere
implicit none
integer n,l,s,i,iter,m,j,jj,nn,lib
real*8 h,z,x,k,h2,alpha,libr
real*8 ecart, ecartmax,critere
real*8 r1,r2,r3,r4,r,wi,wr
complex*16 a,b,c
complex*16 gw,csslw,w,cw,cislw
complex*16 d(256),d1(256),d2(256)
common /n/ n,nn
common /h/ h,h2
common /z/ z
common /x/ x
c le pas est variable
c n :nb de points total, nn : nb de points avant alpha
n=256
nn=128
alpha=0.50
h=alpha/(nn*1.-1.)
h2=(1.-alpha)/(n-nn)
open(18,file='k10r30.dat',status = 'unknown')
C-----rÃ©glage des paramÃ©tres-----
c x est le rayon en unitÃ© de libre parcour moyen libr
x=30.
libr = 1./x
lib=idint(libr/h+0.001)+2
c +2 pour coller ac calcul polynome pour rj3*1
z=libr*2./3.
k=10.*x
write(*,*)'kl='k/x
call initialised2(d2,k,x)
c ici version pour du dynamique
do while (wi .LE. -10)
wi=-8.8
if ((wi .LE. -9.) .AND. (wi .GE. -9.2)) then
wi=wi-0.005
else
wi=wi-0.01
endif
wr=1.D-9
w=complex(wr,wi)
write(*,*)'j='j
c nombre maximum d'itÃ©rations
iter=300
critere=nn - (3*lib-2)
if (critere .LT. 0) then
write(*,*)'changer alpha ou lib'
pause
endif
c-----partie itÃ©rative-----
i=0
ecart=1.
do while((ecart .GT. 1.D-11) .and. (i .LT. iter))
i=i+1
call initialised(d,d2)
call derivdiscret(d,d1)
do s= 3*lib-2,n
call gwr(s,w,d,d1,gw)
d2(s)=1/(1+3*x*gw/(k**2))
enddo
r1=(3*lib-2)**3 - (3*lib-3)**3
r2=(3*lib-2)**2 - (3*lib-3)**2
r3=(3*lib-1)**3 - (3*lib-3)**3
r4=(3*lib-1)**2 - (3*lib-3)**2
a=(d2(3*lib-1)-d2(3*lib-2) - (r2/r4)*( d2(3*lib)-d2(3*lib-
2)))/(r1*h**3-r3*r2*h**3/r4)
b= (d2(3*lib)-d2(3*lib-2)-a*r3*h**3)/(r4*h**2)
c=d2(3*lib-2)-a*((3*lib-3)*h)**3-b*((3*lib-3)*h)**2
do s= 1,3*lib-3
d2(s)=a*(((s-1)*h)**3) + b*(((s-1)*h)**2)+c
enddo
c ici considere d x**3 avant 3*lmoy
ecart= abs( dble(d(1)-d2(1))/dble(d2(1)))
do m=2,n
ecart= dmax1( abs( dble(d(m)-d2(m))/dble(d2(m))) ,
ecart )
enddo
ecartmax=ecart
if ((ecart .LT. 1.D-11) .or. (i .EQ. iter)) then
write(*,*) ,i ,ecartmax
endif
enddo
C pour voir les poles

call derivdiscret(d2,d1)
call gwir(256,1,w,d2,d1,cw)
call cislw(256,1,0,w,cislw)
write(18,'(f12.6,2x,f12.6,2x,f12.6,2x,f12.6,2x,f12.6)') ,wi,
cw,cislw
enddo
close(18)
write(*,*) 'fin'
end
C-----
C c'est ici qu'on estime la valeur de dÃ©part de D
subroutine initialised2(dat,k,x)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
complex*16 dat(n)
real*8 a,k,x,b
a=1- (x/k)**2
b=0.
do i=1,n
dat(i)=complex(a,b)
enddo
end
c juste un changement de variable necessaire pour calculer
IÃ©cart
subroutine initialised(dat,dat2)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
complex*16 dat(n),dat2(n)
real*8 a,k,x,b
do i=1,n
dat(i)=dat2(i)
enddo
end
C-----
C fabrique C(r,r,w)
C-----
C somme les C1 avec le cut-off
subroutine gwr(s,w,dd,dd1,gw)
implicit none
integer n,l,s,lmax,i,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,lib,z,x,h2,r
complex*16 csslw,gw,w
complex*16 d(256),d1(256)
complex*16 dd(n),dd1(n)
common /h/ h,h2
common /z/ z
common /x/ x
common /dd1/ d,d1
do i=1,n
d(i)=dd(i)
d1(i)=dd1(i)
enddo
if (s .LE. nn) then
r= (s-1)*h
else
r= (nn-1)*h +(s-nn)*h2
endif
lmax= idint( r*x/3 )
gw=(0.,0.)
if (lmax .EQ. 0) then
if ( s .EQ. 1) then
call csslw(s,lmax,w,csslw)
gw= x*csslw/3
c ici le cas s=1 Ã© Ã© traitÃ© differemnt dans css-
num
else
call csslw(s,lmax,w,csslw)
gw= r*x*csslw/3
endif
else
do l=0,lmax-1
call csslw(s,l,w,csslw)
gw = gw + csslw * (2**l+1)
enddo
call csslw(s,lmax,w,csslw)
gw = gw + (r*x/3 - lmax)*csslw*(2**lmax+1)
endif
end
C-----
C fabrique C1(r,r,w)

```

```

subroutine csslwr(s,ll,ww,csslw)
implicit none
integer n,l,s,ll,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,z,h2
complex*16 d(256),d1(256),fplus(n),fmoins(n)
complex*16 flplus,flmoins,dn,d1n,w,ww
complex*16 csnum, wronskien, cssnum,csslw
common /l/ l
common /w/ w
common /h/ h,h2
common /dd1/ d,d1
common /z/ z
l=ll
w=ww
csslw=(0.,0.)
flplus=(0.,0.)
flmoins=(0.,0.)
call Sturm(flplus,fplus)
dn=d(n)
d1n=d1(n)
call sturmBis(flmoins,fmoins,dn,d1n)
call cssnumr(s,fplus,fmoins,d,l,cssnum)
csslw=cssnum
c if (s .EQ. 200) then
c write(*,*) 'l=',l
c call traceplus(fplus)
c call tracemoins(fmoins)
c call tracecsnum(s,fplus,fmoins,d,l)
c call tracewronskien(fplus,fmoins,d,l)
c call tracecssnum(fplus,fmoins,d,l)
c endif
end
C calcul proprement dit de C(r,r',w)
subroutine cssnumr(s,fplus,fmoins,d,l,cssnum)
implicit none
integer i,n,s,l,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,z,h2,r
complex*16 fplus(n),fmoins(n),d(n)
complex*16 pw,cssnum
complex*16 wronskien
common /h/ h,h2
common /z/ z
pw=(fmoins(n)+z*d(n))*((fmoins(n)-fmoins(n-1))/h-
(1+1)*fmoins(n))/((fplus(n)+z*d(n))*((fplus(n)-fplus(n-
1))/h+1*fplus(n)))
if (s .EQ. 1) then
call wronskienr(s,fplus,fmoins,d,l,wronskien)
cssnum= fplus(s)*fmoins(s)/wronskien
c en 0 cssnum represente cssnum*r-z, limite finie (car *r ds
gw : cutoff)
else
if (s .LE. nn) then
r=(s-1)*h
call wronskienr(s,fplus,fmoins,d,l,wronskien)
cssnum= ( fplus(s)*fmoins(s)/r - pw * fplus(s)*fplus(s)*(r**(2*1)))
/wronskien
else
r=(nn-1)*h +(s-nn)*h2
call wronskienr(s,fplus,fmoins,d,l,wronskien)
cssnum= ( fplus(s)*fmoins(s)/r - pw * fplus(s)*fplus(s)*(r**(2*1)))
/wronskien
endif
endif
end
C-----
C fabrique C(r,r',w)
C-----
C somme les Cl(r,r',w) avec cut off
subroutine gwir(ii,s,w,dd,dd1,gw)
implicit none
integer n,l,s,lmax,i,nn,ii
common /n/ n,nn
real*8 h,lib,z,x,h2,r,rs,rmax
complex*16 cislw,gw,w
complex*16 d(256),d1(256)
complex*16 dd(n),dd1(n)
common /h/ h,h2
common /z/ z
common /x/ x
common /dd1/ d,d1
do i=1,n
d(i)=dd(i)
d1(i)=dd1(i)
enddo
if (s .LE. nn) then
rs=(s-1)*h
else
rs=(nn-1)*h +(s-nn)*h2
endif
if (ii .LE. nn) then
r=(ii-1)*h
else
r=(nn-1)*h +(ii-nn)*h2
endif
do l=0,lmax-1
call cislw(ii,s,l,w,cislw)
gw= gw + cislw * (2*1+1)
enddo
call cislw(ii,s,lmax,w,cislw)
gw= gw + (rmax*x/3 - lmax)*cislw*(2*1lmax+1)
endif
end
C-----
C fabrique Cl(r,r',w)
subroutine cislw(i,s,ll,ww,cislw)
implicit none
integer n,l,s,ll,nn,i
common /n/ n,nn
real*8 h,z,h2
complex*16 d(256),d1(256),fplus(n),fmoins(n)
complex*16 flplus,flmoins,dn,d1n,w,ww
complex*16 csnum, wronskien, cssnum,cislw
common /l/ l
common /w/ w
common /h/ h,h2
common /dd1/ d,d1
common /z/ z
external csnum
l=ll
w=ww
cislw=(0.,0.)
flplus=(0.,0.)
flmoins=(0.,0.)
call Sturm(flplus,fplus)
dn=d(n)
d1n=d1(n)
call sturmBis(flmoins,fmoins,dn,d1n)
cislw=csnum(i,s,fplus,fmoins,d,l)
c call tracecsnum(s,fplus,fmoins,d,l)
c write(*,*) 'l=',l
c if (s .EQ. 200) then
c write(*,*) 'l=',l
c call traceplus(fplus)
c call tracemoins(fmoins)
c call tracecsnum(s,fplus,fmoins,d,l)
c call tracewronskien(fplus,fmoins,d,l)
c call tracecssnum(fplus,fmoins,d,l)
c endif
end
C calcul de Cl(r,r',w)
complex*16 function csnum(i,s,fplus,fmoins,d,l)
implicit none
integer i,n,s,l,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,z,h2,rs,r
complex*16 fplus(n),fmoins(n),d(n)
complex*16 pw
common /h/ h,h2
common /z/ z
pw=(fmoins(n)+z*d(n))*((fmoins(n)-fmoins(n-1))/h-
(1+1)*fmoins(n))/((fplus(n)+z*d(n))*((fplus(n)-fplus(n-
1))/h+1*fplus(n)))
if (s .LE. nn) then
rs=(s-1)*h
else
rs=(nn-1)*h +(s-nn)*h2
endif
if (i .LE. nn) then
r=(i-1)*h
else
r=(nn-1)*h +(i-nn)*h2
endif
if (i .LT. s) then
call wronskienr(s,fplus,fmoins,d,l,wronskien)
csnum= ( (r**1)*fplus(i)*fmoins(s)/(rs**(1+1))- pw *
fplus(i)*(r**1)*fplus(s)*(rs**1) ) /wronskien
else
call wronskienr(s,fplus,fmoins,d,l,wronskien)

```

```

      csnum= ( (rs**1)*fplus(s)*fmoins(i)/(r**(1+1))- pw *
fplus(i)*(r**1)*fplus(s)*(rs**1) ) /wronskien
      endif
      end
      C -----
      c calcul des fonction propres f+ et f- et du wronskien
      C -----
      C fabrique la fonction propre f+, A partir de la
dA@rivA@e en 0.
      subroutine sturm(f1plus,fplus)
      implicit none
      integer i,n,l,nn
      common /n/ n,nn
      real*8 h,x,h2,r
      complex*16 y(2),yout(2),dydx(2),f1plus
      complex*16 fplus(n)
      common /l/ l
      common /h/ h,h2
      fplus(1)=(1,0)
      y(1)=fplus(1)
      y(2)=( 0,0)
      dydx(1)= f1plus
      dydx(2)=( 0,0)
      c dydx(2) es la derivA@e seconde en 0,proportionnelle A r
      ici car =
      C (r^2 df')
      c f1plus est la derivA@e en i=1 ou r=0 de fplus
      do i=1,nn-1
      x=(i-1)*h
      call rk4(y,dydx,2,x,h,yout)
      fplus(i+1)=yout(1)
      y(1)=yout(1)
      y(2)=yout(2)
      call derivs(x+h,y,dydx)
      enddo
      do i=nn,n-1
      x=(nn-1)*h+(i-nn)*h2
      call rk4(y,dydx,2,x,h2,yout)
      fplus(i+1)=yout(1)
      y(1)=yout(1)
      y(2)=yout(2)
      call derivs(x+h2,y,dydx)
      enddo
      end
      C fabrique la fonction propre f-,
      C A partir de la dA@rivA@e en 1 et de d et d1 au bord
      subroutine sturm(bis(f1moins,fmoins,dn,d1n)
      implicit none
      integer i,n,l,j,nn
      common /n/ n,nn
      real*8 h,x,h2
      complex*16 y(2),yout(2),dydx(2),f1moins,dn,d1n,w
      complex*16 fmoins(n)
      common /l/ l
      common /h/ h,h2
      common /w/ w
      fmoins(n)=(1,0)
      y(1)= fmoins(n)
      y(2)= f1moins*dn
      dydx(1)= f1moins
      dydx(2)=(1+1)*2*y(2)-((1+1)*d1n+complex(0,1)*w)*y(1)
      do j=1,n+1-nn-1
      x=(nn-1)*h+(n+1-j-nn)*h2
      call rk42(y,dydx,2,x,-h2,yout)
      fmoins(n-j)=yout(1)
      y(1)=yout(1)
      y(2)=yout(2)
      call derivs2(x-h2,y,dydx)
      enddo
      do j=n+1-nn,n-3
      x=(n+1-j-1)*h
      call rk42(y,dydx,2,x,-h,yout)
      fmoins(n-j)=yout(1)
      y(1)=yout(1)
      y(2)=yout(2)
      call derivs2(x-h,y,dydx)
      enddo
      fmoins(2)= 2*fmoins(3)-fmoins(4)
      fmoins(1)= 2*fmoins(2)-fmoins(3)
      c taylor ordre 1
      end
      C -----
      C calcul du wronskien
      subroutine wronskienr(i,fplus,fmoins,d,l,wronskien)
      implicit none
      integer i,n,l,nn
      common /n/ n,nn
      real*8 h,h2,r
      complex*16 fplus(n),fmoins(n),d(n)
      complex*16 a,b,c,wronskien
      common /h/ h,h2
      if ( i.EQ. 1 ) then
      wronskien=fplus(1)*fmoins(1)*(2*1+1)*d(1)
      elseif ( i.EQ. n ) then
      wronskien=( fmoins(n)*( fplus(n)-fplus(n-1))/(h2) +
1*fplus(n) ) - fplus(n)*( fmoins(n)-fmoins(n-1))/(h2) -
(1+1)*fmoins(n) )*d(n)
      else
      if ( i.LT. nn ) then
      r=(i-1)*h
      wronskien=( fmoins(i)*( r*(fplus(i+1)-fplus(i-1))/(2*h) +
1*fplus(i) ) - fplus(i)*( r*(fmoins(i+1)-fmoins(i-1))/(2*h) -
(1+1)*fmoins(i) ) )*d(i)
      elseif ( i.EQ. nn ) then
      r=(i-1)*h
      wronskien=( fmoins(i)*( r*(fplus(i+1)-fplus(i-1))/(h+h2)
+ 1*fplus(i) ) - fplus(i)*( r*(fmoins(i+1)-fmoins(i-1))/(h+h2) -
(1+1)*fmoins(i) ) )*d(i)
      else
      r=(nn-1)*h+(i-nn)*h2
      wronskien=( fmoins(i)*( r*(fplus(i+1)-fplus(i-1))/(2*h2)
+ 1*fplus(i) ) - fplus(i)*( r*(fmoins(i+1)-fmoins(i-1))/(2*h2) -
(1+1)*fmoins(i) ) )*d(i)
      endif
      endif
      end
      C -----
      C shA@ma d'intA@gration
      C -----
      C intA@gration de l'A@quation pour f+ rA@duite
      SUBROUTINE RK4(Y,DYDX,N,X,H,YOUT)
      implicit none
      integer i,n,nmax
      PARAMETER (NMAX=10)
      complex*16 Y(N),DYDX(N),YOUT(N),YT(NMAX),DYT(NMAX),DYM(NMAX)
      real*8 h,hh,h6,xh,x
      HH=H*0.5
      H6=H/6.
      XH=X+HH
      DO 11 I=1,N
      YT(I)=Y(I)+HH*DYDX(I)
      11 CONTINUE
      CALL DERIVS(XH,YT,DYT)
      DO 12 I=1,N
      YT(I)=Y(I)+HH*DYT(I)
      12 CONTINUE
      CALL DERIVS(XH,YT,DYM)
      DO 13 I=1,N
      YT(I)=Y(I)+H*DYM(I)
      DYM(I)=DYT(I)+DYM(I)
      13 CONTINUE
      CALL DERIVS(X+H,YT,DYT)
      DO 14 I=1,N
      YOUT(I)=Y(I)+H6*(DYDX(I)+DYT(I)+2.*DYM(I))
      14 CONTINUE
      RETURN
      END
      C A@quation vA@rifiA@e par f+ (entrA@e de rk4)
      subroutine derivs(x,y,dydx)
      implicit none
      integer n,l
      real*8 x,h
      complex*16 y(2),dydx(2)
      complex*16 dx,d1x,w
      external dx
      external d1x
      common /l/ l
      common /w/ w
      dydx(1)=y(2)/(dx(x)*(x**2))
      dydx(2)=-y(2)*(1*2./x)-y(1)*(1*x*d1x(x)+complex(0,1)*w*(x**2))
      end
      C -----
      C intA@gration de l'A@quation pour f- rA@duite
      SUBROUTINE RK42(Y,DYDX,N,X,H,YOUT)
      implicit none
      integer i,n,nmax
      PARAMETER (NMAX=10)
      complex*16 Y(N),DYDX(N),YOUT(N),YT(NMAX),DYT(NMAX),DYM(NMAX)
      real*8 h,hh,h6,xh,x
      HH=H*0.5
      H6=H/6.
      XH=X+HH
      DO 11 I=1,N
      YT(I)=Y(I)+HH*DYDX(I)
      11 CONTINUE
      CALL DERIVS2(XH,YT,DYT)
      DO 12 I=1,N
      YT(I)=Y(I)+HH*DYT(I)

```

```

12 CONTINUE
CALL DERIVS2(XH,YT,DYM)
DO 13 I=1,N
YT(I)=Y(I)+H*DYM(I)
DYM(I)=DYT(I)+DYM(I)
13 CONTINUE
CALL DERIVS2(X+H,YT,DYT)
DO 14 I=1,N
YOUT(I)=Y(I)+H6*(DYDX(I)+DYT(I)+2.*DYM(I))
14 CONTINUE
RETURN
END
C  $\tilde{A}$  equation  $v\tilde{A}$  @rifi $\tilde{A}$  @e par f- (entr $\tilde{A}$  @e de rk42)
subroutine derivs2(x,y,dydx)
implicit none
integer n,l
real*8 x,h,h2
complex*16 y(2),dydx(2)
complex*16 dx,d1x,w
external dx
external d1x
common /l/ l
common /w/ w
common /h/ h,h2
if (x .LT. h/10. ) then
dydx(1)=complex(0.,0.)
dydx(2)=complex(0.,0.)
else
dydx(1)=y(2)/(dx(x)*(x**2))
dydx(2)=y(2)*((1+1)*2./x) -y(1)*((1+1)*x*d1x(x) + com-
plex(0.,1.)*w*x**2)
endif
c ici on evacue le pb en 0,
c la plus petite valeur calcul $\tilde{A}$  @e devant  $\tilde{A}$  a tre  $\tilde{A}$  h/2.
c apres dydx2=(r2df)'=0 , on impose juste f'(0)=0.....
c
c pas besoin,  $\tilde{A}$  §a pose pb pour le calcul de fmoins(2)
c trait $\tilde{A}$  @ plus loin avec ds sturbis passage newton
c
end
C-----
C les fonctions derivs utilise d et sa d $\tilde{A}$  @riv $\tilde{A}$  @e d1
C de fa $\tilde{A}$  §on continu, pas fichier de points,
C on les transforme en fonction avec extrapolation
lin $\tilde{A}$  @aire
complex*16 function dx(x)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,x,h2,alpha
complex*16 d(256),d1(256)
common /h/ h,h2
common /dd1/ d,d1
c i=idint(x/h+0.1)
c comme  $\tilde{A}$  §a,  $\tilde{A}$  @vite les erreurs d'arrondi qd on est juste
autour d'un entier
i=idint(x/h+0.01)+1
if (i .LT. nn) then
dx = d(i) + (x/h-1.*idint(x/h))*d(i+1)-d(i)
else
alpha=(nn-1)*h
i=idint((x-alpha)/h2+0.01) + n/2
if (i .LT. n) then
dx =d(i) + ((x-alpha)/h2-1.*idint((x-alpha)/h2))*d(i+1)-
d(i)
else
dx=d(n)
endif
endif
end
complex*16 function d1x(x)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,x,h2,alpha
complex*16 d(256),d1(256)
common /h/ h,h2
common /dd1/ d,d1
i=idint(x/h+0.01)+1
if (i .LT. nn) then
d1x = d1(i) + (x/h-1.*idint(x/h))*d1(i+1)-d1(i)
else
alpha=(nn-1)*h
i=idint((x-alpha)/h2+0.01) + n/2
if (i .LT. n) then
d1x =d1(i)+((x-alpha)/h2-1.*idint((x-alpha)/h2))*d1(i+1)-
d1(i)
else
d1x=d1(n)
endif
endif
end
C obtient la d $\tilde{A}$  @riv $\tilde{A}$  @e de D de fa $\tilde{A}$  §on discret
subroutine derivdiscret(dat,dat1)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,h2
complex*16 dat(n),dat1(n)
common /h/ h,h2
dat1(1)=(dat(2)-dat(1))/h
do i=2,nn-1
dat1(i)=(dat(i+1)-dat(i-1))/(2*h)
enddo
dat1(nn)=(dat(nn+1)-dat(nn-1))/(h+h2)
do i=nn+1,n-1
dat1(i)=(dat(i+1)-dat(i-1))/(2*h2)
enddo
dat1(n)= (dat(n)-dat(n-1))/h2
end
C-----
C entr $\tilde{A}$  @e
C-----
C permet de lire une valeur de d initiale ext $\tilde{A}$  @rieure au
programme
subroutine lired(dat)
implicit none
integer i,n,a,nn
common /n/ n,nn
complex*16 dat(n)
real*8 b,c,r
open(14,file='d.dat',status = 'old')
do i=1,n
read(14, '(i4,2x,f24.18,2x,f24.18,2x,f24.18)',a,r,b,c)
dat(i)= complex(b,c)
enddo
close(14)
end
C-----
C sorties
C-----
C pour voir le coefficient de diffusion
subroutine trace(dat)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,h2,r
complex*16 dat(n)
common /h/ h,h2
open(11,file='d.dat',status = 'unknown')
do i=1,n
if (i .LE. nn) then
r= (i-1)*h
else
r= (nn-1)*h +(i-nn)*h2
endif
write(11, '(i4,2x,f24.18,2x,f24.18,2x,f24.18)',i,r,dat(i))
enddo
close(11)
end
C pour voir la d $\tilde{A}$  @riv $\tilde{A}$  @e utilis $\tilde{A}$  @e
subroutine traced1(dat)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,h2,r
complex*16 dat(n)
common /h/ h,h2
open(19,file='d1.dat',status = 'unknown')
do i=1,n
if (i .LE. nn) then
r= (i-1)*h
else
r= (nn-1)*h +(i-nn)*h2
endif
write(19, '(i4,2x,f24.18,2x,f24.18,2x,f24.18)',i,r,dat(i))
enddo
close(19)
end
C pour voir la convergence
subroutine tracecart(dat)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,h2
real*8 dat(n)

```

```

common /h/ h,h2
open(18,file='ecart.dat',status = 'unknown')
do i=1,n
write(18, '(i4, 2x, f24.18)',i,dat(i)
enddo
close(18)
end
C pour voir f+...
subroutine traceplus(dat)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,h2,r
complex*16 dat(n)
common /h/ h,h2
open(15,file='fplus.dat',status = 'unknown')
do i=1,n
if (i .LE. nn) then
r= (i-1)*h
else
r= (nn-1)*h +(i-nn)*h2
endif
write(15, '(i4,2x,f24.18,2x,f24.18,2x ,f24.18)',i,r,dat(i)
enddo
close(15)
end
C ...et f-
subroutine tracemoins(dat)
implicit none
integer i,n,nn
common /n/ n,nn
real*8 h,h2,r
complex*16 dat(n)
common /h/ h,h2
open(16,file='fmoins.dat',status = 'unknown')
do i=1,n
if (i .LE. nn) then
r= (i-1)*h
else
r= (nn-1)*h +(i-nn)*h2
endif
write(16, '(i4,2x,f24.18,2x,f24.18,2x,f24.18)',i,r,dat(i)
enddo
close(16)
end
C trace C(r,r',w) dans un fichier, on choisit r'
subroutine tracecsnum(s,fplus,fmoins,d,l)
implicit none
integer i,n,s,l,nn
common /n/ n,nn
real*8 z,h,h2,r
complex*16 fplus(n),fmoins(n),d(n)
complex*16 csnum, wronskien
external csnum
common /z/ z
common /h/ h,h2
open(12,file='csnum.dat',status = 'unknown')
do i=1,n
if ( i .LE. nn ) then
r= (i-1)*h
else
r= (nn-1)*h +(i-nn)*h2
endif
write(12, '(i4,2x,f12.6,2x,f12.6,2x ,f12.6)',i,r, cs-
num(i,s,fplus,fmoins,d,l)
enddo
close(12)
end
C trace le wronskien dans un fichier
subroutine tracewronskien(fplus,fmoins,d,l)
implicit none
integer i,n,s,l,nn
common /n/ n,nn
real*8 z,h,h2,r
complex*16 fplus(n),fmoins(n),d(n)
complex*16 csnum, wronskien
common /z/ z
common /h/ h,h2
open(13,file='wron.dat',status = 'unknown')
do i=1,n
if ( i .LE. nn ) then
r= (i-1)*h
else
r= (nn-1)*h +(i-nn)*h2
endif
call wronskienr(i,fplus,fmoins,d,l,wronskien)
write(13, '(i4, 2x, f12.6, 2x, f12.6,2x ,f12.6)',i,r, wronskien
enddo
close(13)
end
C trace C(r,r,w) dans un fichier
subroutine tracecssnum(fplus,fmoins,d,l)
implicit none
integer i,n,s,l,nn
common /n/ n,nn
real*8 z,h,h2,r
complex*16 fplus(n),fmoins(n),d(n)
complex*16 cssnum, wronskien
common /z/ z
common /h/ h,h2
open(17,file='cssnum.dat',status = 'unknown')
do i=1,n
if ( i .LE. nn ) then
r= (i-1)*h
else
r= (nn-1)*h +(i-nn)*h2
endif
call cssnumr(i,fplus,fmoins,d,l,cssnum)
write(17, '(i4, 2x, f12.6, 2x, f12.6,2x ,f12.6)',i,r,cssnum
enddo
close(17)
end

```